

UNIVERSIDAD EAFIT

Medellín Colombia

MAESTRÍA EN MATEMÁTICAS APLICADAS

Informe Final del proyecto:

“Implementación del método de ELEMENTOS FINITOS en la
determinación del perfil de temperaturas en una llama laminar
premezclada”:

Efecto de la difusión

Presentado por: Jaime Bolaños

Director: Jairo Villegas

Bogotá-Colombia

Octubre de 2015

Contenido

1	Preliminares	6
1.1	Fracción molar del componente i	7
1.2	Fracción másica del componente i	7
1.3	Masa molar (M_i)	7
1.4	Masa Molar media:	7
1.5	Densidad: Propiedad intensiva	8
1.6	Ecuación de Estado de Gases Ideales	8
1.7	Concepto de viscosidad	9
1.8	Capacidad Calorífica	10
1.8.1	Capacidad calorífica a volumen constante:	10
1.8.2	Capacidad calorífica a presión constante:	10
1.9	Ley de Fourier (conducción de Calor)	11
1.10	Ley de Fick de la difusión binaria.	12
1.11	Algunos números adimensionales:	14
1.11.1	Números de Reynolds:	14
1.11.2	Número de Scmith	14
1.11.3	Número de Lewis:	15
1.11.4	Número de Prandtl:	15
1.12	Algunos aspectos básicos en teoría de llamas.	15
1.12.1	Tipos básicos de llamas.	16

1.12.2	Investigación Experimental en llamas.	16
2	Descripción Matemática de una llama Premezclada Laminar.	18
2.1	Ecuaciones de conservación para flujos laminares en llamas planas premez- cladas.	18
2.2	Conservación total de masa.	20
2.2.1	Consevación de masa para la especie i	20
2.3	Conservación de la entalpía de la mezcla.	21
2.4	Transporte de calor y masa	22
2.5	Descripción del frente de llama en el caso de una llama laminar premezclada.	23
3	Modelo de combustión unidimensional para llamas laminares premez- cladas	25
4	Cotas para la propagación del frente de llama	31
4.1	Modelo RD de combustión de una variable simple	31
4.2	Cotas inferiores	35
4.3	Cotas superiores	38
4.4	Pérdidas por radiación: Cotas para la velocidad de propagación de pulsos .	41
5	Método de elementos finitos	44
5.1	Residuos Ponderados Método de Galerkin	44
5.2	Discretización del dominio y polinomios de interpolación	45
5.3	Elementos finitos sin radiación.	60
5.4	Elementos finitos con radiación.	63
5.5	Diferencias Finitas vs Elementos Finitos.	66
5.6	Determinación de la cotas inferiores: Una propuesta para $g(\theta)$	75
6	Conclusiones	82
7	Bibliografía	84

INTRODUCCIÓN

El primer paso para el desarrollo de este proyecto lo constituyó la revisión, con cierto detalle, del artículo "Bounds for the speed of combustion flames: the effect of mass diffusion" [1]. En este trabajo los autores realizan una propuesta para hallar tanto cotas superiores como inferiores para la velocidad de la llama. Así mismo analizan las respuestas de la llama bajo la influencia de los fenómenos de difusión y de radiación, utilizando el METODO DE DIFERENCIAS FINITAS para así obtener perfiles de temperaturas a partir del modelo matemático que describe el fenómeno.

En el presente trabajo se aplicó el METODO DE ELEMENTOS FINITOS al sistema de ecuaciones diferenciales para obtener los perfiles de temperatura, explorando también el efecto de la difusión y la radiación, al igual que el artículo, para llamas laminares premezcladas.

Además se explorará una función de ensayo tipo exponencial para sustituir la función polinómica propuesta por los autores y se compararán los resultados.

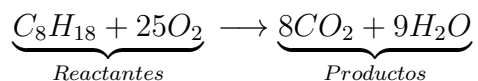
Los datos en el METODO DE DIFERENCIAS FINITAS fueron procesados con una hoja de cálculo (openOffice) y el METODO DE ELEMENTOS FINITOS fue programado en una Aplicación cálculo simbólico (CAS) para IPAD denominada TI-nspire.

Capítulo 1

Preliminares

Para comprender los procesos de combustión se hace necesario revisar algunos conceptos básicos de la física, la química y la matemática.

Un proceso de combustión es una reacción química en la cual hay, generalmente, gran desprendimiento de energía. Además hay ruptura de enlaces en los reactantes para formar nuevos enlaces en los productos. Por ejemplo el proceso de combustión del octano:



Por principio de conservación de la masa la cantidad de átomos se conserva (C,H,O), mientras que para las moléculas no se puede afirmar lo mismo. Se puede ver, por ejemplo, que se rompen los enlaces C-H (en el C_8H_{18}) y se forman enlaces O-H (en el H_2O).

La cantidad de sustancia es medida en unidades de masa (kg) o en número de moles (n). Un mol de sustancia equivale a $6,023 \times 10^{23}$ partículas (átomos, moléculas, iones,...)

Las siguientes relaciones serán útiles en el transcurso de este documento.

Si N es el número total de especies podemos definir los conceptos a continuación:

1.1 Fracción molar del componente i

Si m_i es la masa del componente i

$$x_i \equiv \frac{n_i}{n}, \quad \text{con} \quad n = \sum_{i=1}^N n_i \quad (1.1)$$

1.2 Fracción másica del componente i

$$w_i = \frac{m_i}{m} \quad m = \sum_{i=1}^N m_i \quad (1.2)$$

1.3 Masa molar (M_i)

Es la masa de $6,023 \times 10^{23}$ partículas (átomos, moléculas, iones,...) dado en g/mol

$$m_i = M_i n_i \quad (1.3)$$

1.4 Masa Molar media:

Si M_i es la masa molar del componente i en $\frac{kg}{mol}$ entonces la masa molar promedio \overline{M} es:

$$\overline{M} = \sum_{i=1}^N x_i M_i = \frac{m}{n} \quad (1.4)$$

También es posible obtener las siguientes relaciones para w_i y x_i :

$$w_i = \frac{m_i}{m} = \frac{n_i M_i}{\sum_{j=1}^N n_j M_j} = \frac{\cancel{n} x_i M_i}{\cancel{n} \sum_{j=1}^N x_j M_j} = \frac{x_i M_i}{\sum_{j=1}^N x_j M_j} \quad (1.5)$$

$$x_i = \frac{n_i}{n} = \frac{\frac{m_i}{M_i} \cdot \frac{1}{m}}{n \cdot \frac{1}{m}} = \frac{\frac{w_i}{M_i}}{\frac{n}{m}} = \frac{w_i}{M_i} \cdot \overline{M} = \frac{\frac{w_i}{M_i}}{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^N n_j} = \frac{\frac{w_i}{M_i}}{\sum_{j=1}^N \frac{w_j}{M_j}} \quad (1.6)$$

1.5 Densidad: Propiedad intensiva

Densidad másica (o simplemente densidad)

$$\rho = \frac{m}{V} \quad \left(\frac{kg}{m^3} \right) \quad (1.7)$$

Densidad molar (o concentración)

$$c = \frac{n}{v} \quad \left(\frac{mol}{m^3} \right) \quad (1.8)$$

La densidad está relacionada con la masa molar media \overline{M} así:

$$\rho c = \frac{m}{n} = \overline{M} \quad (1.9)$$

1.6 Ecuación de Estado de Gases Ideales

Se tendrá en cuenta la teoría de los gases ideales ya que las condiciones en que se propagan una llama suceden, usualmente, a bajas presiones y altas temperaturas

$$PV = nRT \quad (1.10)$$

donde P presión (en Pa =Pascuales), T temperatura (en K), V volumen (en m^3) y

$$R = 8,314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$$

Si de la ecuación anterior despejamos c y ρ , se tienen respectivamente:

$$c = \frac{P}{RT} \quad (1.11)$$

$$\rho = C\overline{M} = \frac{P\overline{M}}{RT} = \frac{P}{RT \sum_{j=1}^N \frac{w_i}{M_i}} \quad (1.12)$$

1.7 Concepto de viscosidad

La viscosidad está relacionada con la resistencia a fluir y se define mediante la ley de Newton como: simplemente

$$\tau_{xy} = -\mu \frac{dv_x}{dy} \quad (1.13)$$

Donde τ_{xy} es la fuerza cortante en la dirección x sobre un área unitaria en la dirección de la variable y (perpendicular a x) y el término $\frac{dv_x}{dy}$ es el gradiente de velocidad y la constante de proporcionalidad μ es la viscosidad del fluido.

Como se muestra en la siguiente figura. En $y = 0$ el fluido tiene una velocidad v_{x0} y por

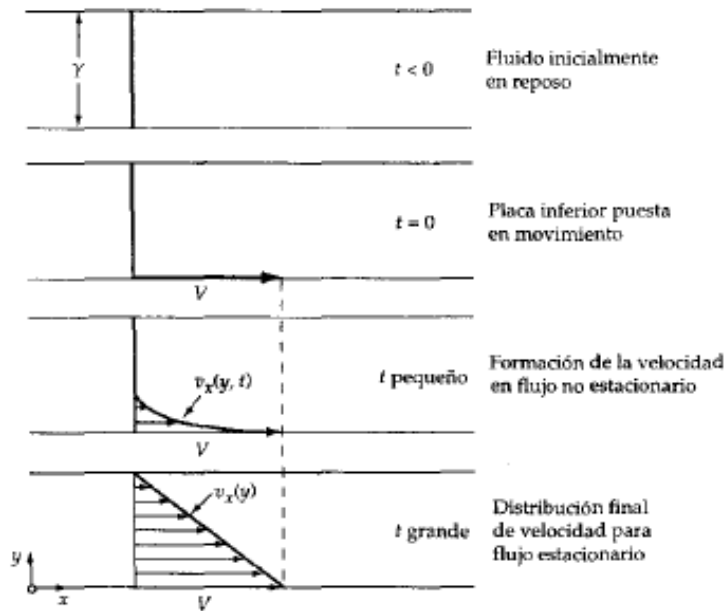


Figura 1.1: *Perfil de velocidad en estado estacionario en flujo laminar (tomado de Bird página 12 [2])*

tanto una cantidad de movimiento.

Una parte de esta cantidad de movimiento se transmite a la capa inmediatamente superior para que dicha capa superior mantenga una velocidad en la dirección x . Esta transmisión de cantidad de movimiento se sigue dando entre capas adyacentes de manera sucesiva.

Así τ_{xy} puede verse como flujo de cantidad de movimiento correspondiente a la dirección

x en la dirección positiva de la y . La cantidad de movimiento se transmite desde regiones de altas velocidades a regiones de bajas velocidades.

Por otro lado se suele definir también la viscosidad cinemática como:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (1.14)$$

1.8 Capacidad Calorífica

La capacidad calorífica es una propiedad que depende cómo se efectúe el proceso: a volumen constante o a presión constante.

1.8.1 Capacidad calorífica a volumen constante:

$$Cv = Cv(T) = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta U}{\Delta T} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v \quad (1.15)$$

donde U es la energía interna (variable de estado) y T la temperatura.

1.8.2 Capacidad calorífica a presión constante:

$$Cp = Cp(T) = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta H}{\Delta T} = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \quad (1.16)$$

donde H es una variable de estado llamada entalpía.

Para un gas ideal el calor sensible transmitido a volumen constante está dado por:

$$Q = \Delta U = \int_{T_1}^{T_2} Cv(T) dT \quad (1.17)$$

y el calor sensible transmitido a presión constante está dado por:

$$Q = \Delta H = \int_{T_1}^{T_2} Cp(T) dT \quad (1.18)$$

Para gases ideales también se cumple la relación

$$Cp = Cv + R \quad (1.19)$$

siendo R la constante universal de gases ideales.

1.9 Ley de Fourier (conducción de Calor)

Este fenómeno es un transporte molecular de energía. Si se tiene un material sólido situado entre dos placas paralelas de área A separadas una distancia Y , cuyas temperaturas son T_0 y T_1 respectivamente ($T_1 > T_0$, constantes), se desarrolla, con un tiempo suficientemente grande, un perfil de temperatura como se muestra a continuación en la figura 1.2 Si el ΔT es pequeño entonces, la cantidad de calor que fluye através del sólido por unidad de área está dada por:

$$\frac{Q}{A} = \lambda \frac{\Delta T}{Y} \quad (1.20)$$

donde λ es la conductividad térmica del material (líquido, sólido o gas).

Es muy usada la forma diferencial tomando el límite cuando el espesor de la lámina tiende a cero

$$q_y = -\lambda \frac{dT}{dy} \quad (1.21)$$

donde q_y es el flujo de calor por unidad de área (flux de calor).

Para cada una de las direcciones x, y, z se tiene:

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad q_z = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \quad (1.22)$$

En forma vectorial se puede escribir

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad (1.23)$$

Adicionalmente a la conductividad térmica se define la difusividad térmica α así:

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (1.24)$$

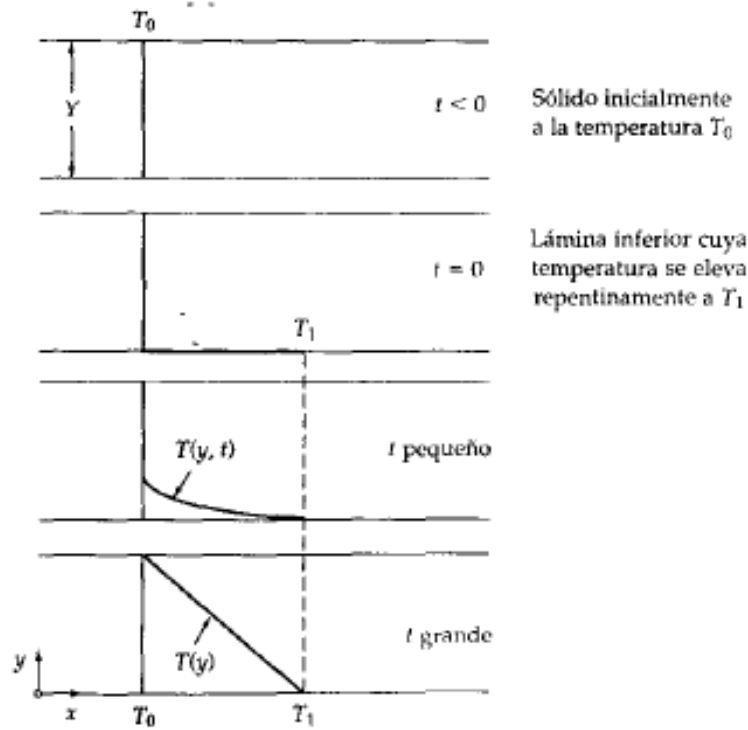


Figura 1.2: Formación del perfil de temperatura en estado estacionario: tomado de Bird página 310 [2]

1.10 Ley de Fick de la difusión binaria.

Esta ley describe el movimiento de una especie química A a través de una mezcla de componentes A y B . La fuerza impulsora es un gradiente de concentración del componente A . Es una ley análoga al transporte de momento y a la conducción térmica.

En la Ley de Fick de difusión binaria el flujo másico ω_{Ay} de la sustancia A que se desplaza en la dirección perpendicular y , por su unidad de área es:

$$\frac{\omega_{Ay}}{Area} = -\rho D_{AB} \frac{d\omega_A}{dy} \quad (1.25)$$

donde D_{AB} es la difusividad.

Usualmente se llama a la cantidad $\frac{\omega_{Ay}}{Area} = \dot{j}_{Ay}$ densidad de flujo molecular de materia en masa.

La ecuación

$$\dot{j}_{Ay} = -\rho D_{AB} \frac{d\omega_A}{dy} \quad (1.26)$$

es la versión unidimensional de la Ley de Fick de difusión, válida para soluciones binarias de sólidos, líquidos o gases, en donde \dot{j}_{Ay} representa la densidad de flujo de masa con respecto a la velocidad v_y la cual es equivalente a:

$$v_y = \omega_A \cdot v_{Ay} + \omega_B \cdot v_{By} \quad (1.27)$$

La velocidad v_y es un promedio ponderado de acuerdo a las fracciones en masa. También se le llama velocidad media de masa.

Por otro lado las velocidades v_A y v_B no son velocidades instantáneas de las moléculas, representan la media aritmética de las velocidades de todas las moléculas de cada especie en un volumen pequeño.

En general la densidad de flujo de masa \dot{j}_{Ay} se puede definir como:

$$\dot{j}_{Ay} = \rho w_A (v_{Ay} - v_y) \quad (1.28)$$

De manera análoga se define para el componente B .

En el proceso de interdifusión de las especies A y B el centro de masa se va desplazando en la dirección "y" si las masas molares A y B son diferentes. Ahora bien, si se atiende a la manera como están definidas las densidades de los flujos de masa tiene la relación:

$$\dot{j}_{Ay} + \dot{j}_{By} = 0 \quad (1.29)$$

Generalizando para las direcciones x, y, z se tienen las expresiones de la Ley de Fick en forma tridimensional.

$$\dot{j}_A = -\rho \mathcal{D}_{AB} \nabla \omega_A \quad \text{Componente } A \quad (1.30)$$

$$\dot{j}_B = -\rho \mathcal{D}_{BA} \nabla \omega_B = -\rho \mathcal{D}_{AB} \nabla \omega_B \quad \text{Componente } B. \quad (1.31)$$

Es conveniente anotar que tanto la difusividad de masa \mathcal{D}_{AB} como la difusividad térmica $\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ y la difusividad de la cantidad de movimiento $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ (viscosidad

cinemática) tienen dimensiones de

$$\frac{[longitud]^2}{tiempo}$$

De esta manera las relaciones entre estas cantidades son grupos adimensionales.

1.11 Algunos números adimensionales:

1.11.1 Números de Reynolds:

Propiedad que depende de las propiedades físicas del fluido, velocidad y la geometría del ducto que lo transporta:

$$Re = \frac{D \cdot v \cdot \rho}{\mu} \quad (1.32)$$

donde:

D : diámetro de la tubería $[L]$.

v : velocidad del fluido $\frac{[L]}{[t]}$.

ρ : densidad del fluido $\frac{[M]}{[L^3]}$.

μ : viscosidad del fluido $\frac{[M]}{[L \cdot t]}$.

El flujo se puede clasificar como laminar, de transición o turbulento de acuerdo al Re , así:

$Re < 2100$	Laminar
$2100 < Re < 4000$	Transición
$Re > 4000$	Turbulento

1.11.2 Número de Scmith

$$Sc = \frac{v}{D_{AB}} = \frac{\nu}{\rho D_{AB}} \quad (1.33)$$

Relación entre la transferencia molecular de cantidad de movimiento con la transferencia molecular de materia.

1.11.3 Número de Lewis:

$$Le = \frac{D_{AB}}{\alpha} = \frac{\rho C_p D_{AB}}{\lambda} \quad (1.34)$$

Relación entre la transferencia de calor convectiva con la transferencia de masa convectiva.

1.11.4 Número de Prandtl:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{C_p \mu}{K} \quad (1.35)$$

Relación entre la velocidad de difusión de cantidad de movimiento y la velocidad de difusión de calor.

1.12 Algunos aspectos básicos en teoría de llamas.

El problema de la combustión ha sido abordado desde un enfoque experimental y desde un enfoque teórico. Desde el punto de vista experimental se han presentado grandes dificultades en situaciones donde el flujo es turbulento en donde la problemática radica en la imposibilidad de comprender el fenómeno desde la cinética, la transferencia de calor y la descripción del perfil de temperaturas entre otras. Esta rama no ha sido muy desarrollada. Los sistemas de combustión y control de contaminantes, por ejemplo, está basada en la experimentación práctica.

En contraste a la visión empírica del problema cuya finalidad es “cómo hacerlo”, están el desarrollo de descripciones matemáticas de los fenómenos de combustión.

Dichos modelos, los cuales han venido desarrollándose desde hace algunos 15 años se han orientado a realizar análisis detallado de los flujos, tasas de transferencia de calor y distribuciones de velocidad entre otras.

Los modelos matemáticos que se han venido generando no tienen aún la potencia y el alcance que se requieren. Sin embargo han permitido a los ingenieros especialistas realizar procesos de optimización y diseño así como también cambios en sus procesos de

combustión como por ejemplo cambios en la geometría de hornos, condiciones de entrada de gases Brizuela [3].

1.12.1 Tipos básicos de llamas.

La llama puede considerarse un medio gaseoso en el que se desarrollan reacciones de combustión.

De acuerdo al tipo de flujo se pueden clasificar en laminares, si el $N_{Re} < 2000$, y turbulentas. El primer tipo de flujo se caracteriza por gradientes de velocidad bajos, lo cual hace que no haya entrecruzamiento de líneas de flujo. Las partículas en régimen laminar se desplazan en forma de capas o láminas.

Por su parte en el régimen turbulento se presenta si $N_{Re} > 4000$. Este tipo de flujo se caracteriza por que las partículas no se mueven utilizando trayectorias definidas, las fuerzas viscosas son despreciables y hay formación de remolinos con choques frecuentes entre las partículas.

También pueden clasificarse las llamas de acuerdo al punto en donde se mezclen combustible y el oxidante se mezclan antes de ser quemados. Cuando la mezcla se presenta simultáneamente con el proceso de quemado se considera una llama no premezclada.

El frente de llama es la zona que marca la separación entre el gas quemado y el gas sin quemar. Usualmente el espesor del frente de llama va desde 1 mm hasta ocupar totalmente la cámara de combustión.

La propagación de la llama es el desplazamiento del frente de llama a través de la mezcla de gases.

1.12.2 Investigación Experimental en llamas.

En el diseño de procesos la simulación por computador cobra cada vez más importancia debido a la potencia cada vez mayor en procesos de modelamiento y predicción de propiedades de sustancias y de mezclas entre otras.

Para una mezcla gaseosa es suficiente conocer las siguientes variables: velocidad, temperatura, presión, densidad y la fracción molar para cada una de las especies. Por ejemplo en un flujo gaseoso la medida de la velocidad se llama anemometría y el instrumento frecuentemente usado es el anemómetro de filamento. Una gráfica típica de la medida de la velocidad de las partículas a diferentes distancias del origen de la llama, ver figura 1.3, aquí se muestran las mediciones de velocidad para una llama en flujo turbulento. Así mismo existen técnicas para evaluar cada una de las propiedades

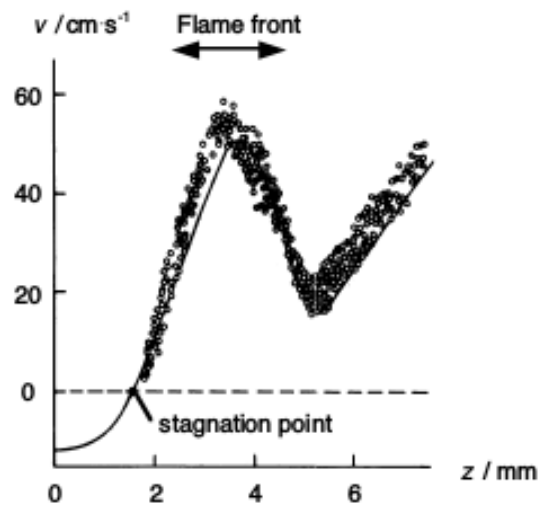


Figura 1.3: *Medidas de velocidad de las partículas (puntos) y las velocidades calculadas en un flujo a contracorriente de una llama no premezclada tomado de Warnatz página 20 [4]*

mencionadas.

Capítulo 2

Descripción Matemática de una llama Premezclada Laminar.

En un flujo de un fluido, como se mencionó antes, en donde hay una reacción química puede considerarse que esta completamente descrito si se especifica la presión, la densidad, la temperatura, la velocidad de flujo y la concentración de cada especie. Los cambios en estas variables suceden por cualquiera de los siguientes mecanismos:

- a.) Flujo del fluido (convección).
- b.) Reacción química.
- c.) Transporte molecular (conducción de calor, difusión o viscosidad).
- d.) Radiación

En estos tipos de cambios que se generan en flujos reactivos existen algunas propiedades que se conservan como la masa, la energía y el momento.

2.1 Ecuaciones de conservación para flujos laminares en llamas planas premezcladas.

Un ejemplo de este tipo de llamas lo constituye un quemador plano. Los gases emergen del quemador y fluyen hacia el frente de la llama, la cual es una zona delgada que separa

los gases no quemados de los gases quemados, ver figura 2.1

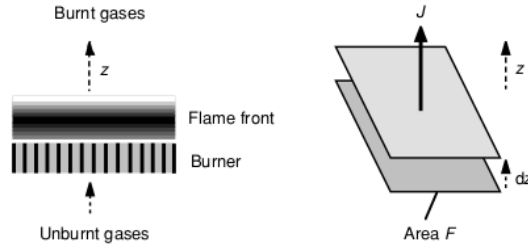


Figura 2.1: *Ilustración esquemática de una llama laminar premezclada tomado de Warnatz página 30 [4]*

Por otra parte se supone que los efectos de borde se puede despreciar ya que el diámetro del quemador es suficientemente grande.

Las propiedades de la llama antes mencionadas depende exclusivamente de la distancia z desde el quemador al frente de llama.

Para simplificar el modelo se harán las siguientes suposiciones:

1. Comportamiento de gas ideal.
2. Fuerzas gravitacionales despreciables.
3. Sistema continuo: Esto quiere decir que la trayectoria media de las moléculas es pequeña si se le compara con el grosor de la llama.
4. Presión constante.
5. Energía cinética del gas despreciable.
6. Efecto Dufour despreciable.
7. Radiación despreciable.
8. Hay equilibrio térmico local.
10. La llamas se encuentra en estado estacionario.
11. Es válida la relación:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial z} = Q \quad (2.1)$$

donde z es una coordenada espacial, t es el tiempo, W es cualquier variable conservativa E por unidad de volumen. Asi $[w] = \frac{[E]}{m^3}$. $[W]$ significa unidades de W . J es el flux (ó

flux de densidad) $[J] = \frac{[E]}{\text{superficie} \cdot \text{tiempo}}$. Q es un sumidero de la variable conservativa E , así $[Q] = \frac{[E]}{\text{volumen} \cdot \text{tiempo}}$.

2.2 Conservación total de masa.

Para la conservación de la masa podemos reemplazar W por la densidad total de masa (en $\frac{kg}{m^3}$) y el flujo por el producto de la velocidad media de masa por la densidad. De esta manera $J = \rho v$ (en $\frac{kg}{m^2s}$.)

El término Q es nulo ya que en el proceso no hay creación ni destrucción de masa. De esta manera se obtiene la ecuación para la conservación de la masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} = 0 \quad (2.2)$$

2.2.1 Consevación de masa para la especie i .

Recordando que $\rho_i = \frac{m_i}{V} = w_i \rho = W$ la ecuación para la conservación de la especie i queda:

$$\frac{\partial(\rho w_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w_i v_i)}{\partial z} = r_i \quad (2.3)$$

Debido a las reacciones químicas, para cada especie i hay producción o consumo de materia y por tanto Q esta dado por:

$$Q = M_i \left(\frac{\partial C_i}{\partial t} \right)_{quim} = r_i \quad (2.4)$$

En donde M_i es la masa molecular de la especie i en $\frac{kg}{mol}$. $\left(\frac{\partial C_i}{\partial t} \right)_{quim}$ es la velocidad de producción en $\frac{mol}{m^3s}$ y r_i la velocidad química de producción en $\frac{kg}{m^3s}$.

La velocidad de difusión v_i se compone de la velocidad media de la masa v (respecto al centro de masa de la mezcla) y la velocidad de difusión V_i (también relativa al centro de masa)

$$v_i = v + V_i \quad (2.5)$$

Teniendo en cuenta esta última ecuación y diferenciando 2.3 se llega a:

$$w_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial w_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial w_i}{\partial z} + w_i \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} + \frac{\partial \rho w_i V_i}{\partial z} = r_i \quad (2.6)$$

y como $j_i = \rho w_i V_i = \rho_i V_i$ podemos reescribir la ecuación anterior así:

$$w_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial w_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial w_i}{\partial z} + w_i \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} + \frac{\partial j_i}{\partial z} = r_i \quad (2.7)$$

Utilizando la ecuación (2.2) para la conservación de especies queda:

$$\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial w_i}{\partial z} + \frac{\partial j_i}{\partial z} = r_i \quad (2.8)$$

2.3 Conservación de la entalpía de la mezcla.

Una propiedad de los sistemas abiertos es la entalpía definida como

$$\hat{h} = \hat{u} + p\hat{v} \quad (2.9)$$

donde \hat{u} es la energía interna en $\frac{kJ}{Kg}$, p es la presión en kPa y \hat{v} el volumen específico.

Para la ecuación general de balance $\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial z} = Q$ se tiene que:

$$W = \sum_j \rho_j h_j = \sum_j \rho w_j h_j \quad \frac{Julios}{m^3} \quad (2.10)$$

$$J = \sum_j \rho_j v_j h_j + j_q = \sum_j \rho v_j w_j h_j + j_q \quad \frac{Julios}{m^2 s} \quad (2.11)$$

$$Q = 0 \quad (2.12)$$

La última ecuación se debe a la Ley de conservación de energía. En donde h_j es la entalpía específica para la especie i en $\frac{kJ}{kg}$, j_q es el flujo de calor que se produce por el gradiente de temperatura. Y el término $\sum \rho_j v_j h_j$ es el cambio de entalpía que se produce por el flujo de especies.

Utilizando la ecuación $v_j = v + V_j$ y procediendo como antes tenemos:

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial z}(\rho v w_j h_j) + \sum_j \frac{\partial}{\partial z}(\rho V_j w_j h_j) + \frac{\partial j_q}{\partial z} + \sum_j \frac{\partial}{\partial t}(\rho w_j h_j) = 0 \quad (2.13)$$

Sumando el primero y el cuarto término obtenemos:

$$\begin{aligned} & \sum_j \left[\rho v w_i \frac{\partial h_j}{\partial z} + h_j \frac{\partial(\rho v w_j)}{\partial z} \right] + \sum_j \left[\rho w_j \frac{\partial h_j}{\partial t} + h_j \frac{\partial(\rho w_j)}{\partial t} \right] \\ &= \rho v \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \rho \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial t} + \sum_j h_j \left(\frac{\partial(\rho v w_j)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho w_j)}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Como $\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial w_i}{\partial z} + \frac{\partial j_i}{\partial z} = r_i$ entonces (2.14) se puede escribir

$$5.1 = \rho v \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \rho \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial t} + \sum_j h_j r_j - \sum_j h_j \frac{\partial j_i}{\partial z} \quad (2.15)$$

El segundo término de la ecuación (2b.13), queda

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial z} (\rho V_j w_j h_j) = \sum_j \rho w_j V_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \sum_j h_j \frac{\partial(\rho w_j V_j)}{\partial z} = \sum_j \rho w_j V_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \sum_j h_j \frac{\partial j_j}{\partial z} \quad (2.16)$$

Sumando los términos y teniendo en cuenta que $j_j = \rho w_j V_j$:

$$= \rho v \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \rho \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial t} + \sum_j h_j r_j - \sum_j h_j \frac{\partial j_i}{\partial z} + \frac{\partial j_q}{\partial z} + \sum_j \rho w_j V_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \sum_j h_j \frac{\partial j_j}{\partial z} = 0 \quad (2.17)$$

$$\rho v \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \rho \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial t} + \sum_j h_j r_j + \sum_j j_j \frac{\partial h_j}{\partial z} + \frac{\partial j_q}{\partial z} = 0 \quad (2.18)$$

2.4 Transporte de calor y masa

Para el flujo laminar premezclada sigue siendo válida la Ley de Fourier

$$j_q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \quad \text{en} \quad \frac{\text{Julios}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad (2.19)$$

donde:

λ es la conductividad térmica de la mezcla en $\frac{\text{Julios}}{\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}}$.

Para el flujo de masa se utiliza la forma extendida de la Ley de Fick, propuesta por

Warnatz página 33 [4]

$$j_i = \frac{C^2}{\rho} M_i \sum_j M_j D_{ij} \frac{\partial x_j}{\partial z} - \frac{\alpha_i}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \quad \text{en} \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad (2.20)$$

C : concentración molar en $\frac{mol}{m^3}$.

D_{ij} : es el coeficiente de difusión multicomponente.

x_j : la fracción molar.

α_i : es el coeficiente de difusión térmica $\alpha = \frac{k}{\rho C_\rho}$ en $\frac{kg}{m \cdot s}$ de la especie i .

Sin embargo para propositos prácticos se ha propuesto la fórmula simplificada:

$$j_i = -D_i^M \rho \frac{w_i}{x_i} \frac{\partial x_i}{\partial z} - \frac{\alpha}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.21)$$

Donde $-D_i^M$ representa el coeficiente de difusión de la especie i en la mezcla de las otras especies.

2.5 Descripción del frente de llama en el caso de una llama laminar premezclada.

Para una descripción completa del frente de una llama laminar premezclada es necesario, como en un proceso de combustión, determinar la temperatura, la presión, la velocidad v y las densidades parciales ρ_i y las fracciones en masa w_i .

Inicialmente se puede asumir la presión como constante y homogénea. La densidad se puede calcular con la ley de los gases ideales a partir de la temperatura, la presión y la composición.

Utilizando la suposición de una llama estacionaria es posible determinar la velocidad con la ecuación de continuidad, así

$$\frac{\partial(pv)}{\partial z} = 0 \quad \rightarrow \quad pv = constante \quad (2.22)$$

Sabiendo lo anterior y usando el flujo másico $(\rho \cdot v)$ de los gases no quemados se puede calcular cada punto de la llama.

La fracción másica $w_i (i = 1, \dots, N)$, se determina resolviendo las $N - 1$ ecuaciones de conservación de especies utilizando además el hecho de que $\sum_i w_i = 1$.

La difusión térmica puede ser importante para componentes con baja masa molar tales como H , H_2 o He . No obstante este fenómeno puede no ser tenido en cuenta ya que estos componentes se encuentran usualmente en bajas concentraciones.

Teniendo en cuenta que $j_i = -D_i^M \rho \frac{\partial w}{\partial z}$ es posible escribir la ecuación:

$$\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial w_i}{\partial z} + \frac{\partial j_i}{\partial z} = r_i$$

como

$$\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D^M \rho \frac{\partial w_i}{\partial z} \right) - \rho v \frac{\partial w_i}{\partial z} + r_i \quad (2.23)$$

La temperatura se puede calcular transformando la ecuación (2.23) y utilizando las ecuaciones : $j_q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z}$, $dh_i = C_{\rho i} dT$ y $C_\rho = \sum_i w_i C_{\rho, i}$ (capacidad calorífica de la mezcla) así:

$$\rho v \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial z} = \rho v C_{\rho, j} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial j_q}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.25)$$

$$\rho \sum_j w_j \frac{\partial h_j}{\partial t} = \rho C_\rho \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.26)$$

$$\sum_j j_j \frac{\partial h_j}{\partial z} = \sum_j j_j C_\rho \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.27)$$

y la ecuación (2.18) queda:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left(\rho v C_p + \sum_j j_j C_{pj} \right) \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_j h_j r_j \quad (2.28)$$

Esta última ecuación puede ser escrita como:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_i C_{pi} \rho_i v_i \frac{\partial T}{\partial z} + q' \quad (2.29)$$

Ya que $\rho v = 0$, esto quiere decir que la velocidad media de masa es nula y además

$$q' = - \sum_i h_i r_i$$

Capítulo 3

Modelo de combustión unidimensional para llamas laminares premezcladas

Experimentalmente se ha determinado que las llamas con flujo laminar y premezcladas se propagan con una velocidad determinada y para calcularla se empleará un modelo unidimensional de combustión para llama laminar premezclada con sólo dos componentes: Combustible F y no combustibles(sustancias inertes y oxidantes) NF. Las ecuaciones que se utilizarán serán las propuestas por Warnatz[4] y desarrolladas en el capítulo 2, con $i = F, NF$

Así la ecuación de conservación será:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i v_i)}{\partial z} = r_i \quad \text{con} \quad i = F, NF \quad (3.1)$$

donde v_i es la velocidad de difusión, r_i es la velocidad química de producción y ρ_i la densidad de especies. Adicionalmente a la ecuación (2.32) se tiene en cuenta la ecuación para el balance de energía deducida en la sección anterior para el componente i :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \sum_i C_{p_i} \rho_i v_i \frac{\partial T}{\partial r} + q' \quad \text{con} \quad i = F, NF \quad (3.2)$$

Donde T es la temperatura, λ la conductividad térmica, C_p es la capacidad calorífica del componente i .

Con la velocidad de difusión satisfaciendo la relación:

$$\rho_F v_F = -\rho_{NF} v_{NF} \quad (3.3)$$

Donde la velocidad media de masa es cero. Y a partir de la densidad total de la mezcla se puede obtener de la siguiente expresión:

$$\rho = \rho_F + \rho_{NF} \quad (3.4)$$

considerándose la mezcla reaccionante como un flujo no compresible.

$$\rho C_p = \rho_F C_{pF} + \rho_{NF} C_{pNF} \quad (3.5)$$

y q' es el calor producido por la reacción de combustión o término fuente:

$$-\sum_i h_i r_i \quad (3.6)$$

De acuerdo a la ecuación (3.2) la velocidad de cambio de la temperatura no depende únicamente de la conductividad térmica más la generación de calor también depende de la difusión de especies con diferentes capacidades caloríficas.

Sustituyendo la ecuación (3.3) en (3.2) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) - (C_{pF} - C_{pNF}) \rho_F v_F \frac{\partial T}{\partial r} + q' \quad (3.7)$$

Veamos:

$$\begin{aligned} \sum_i C_{p_i} \rho_i v_i &= C_{pF} \rho_F v_F + C_{pNF} \rho_{NF} v_{NF} \\ &= C_{pF} \rho_F v_F - C_{pNF} \rho_F v_F \\ &= (C_{pF} - C_{pNF}) \rho_F v_F \end{aligned}$$

Ahora si aplicamos la ley de Fick para la difusión del combustible se tiene:

$$j_F = \rho_F v_F = -D_F \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \quad (3.8)$$

Sustituyendo ley de Fick obtenida en la ecuación (1.7):

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + (C_{p_F} - C_{p_{NF}}) \rho_F v_F D_F \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + q' \quad (3.9)$$

Donde el término $(C_{p_F} - C_{p_{NF}}) \rho_F v_F D_F \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r}$ es la contribución al cambio de energía interna debida a los procesos de difusión el cuál tiende a desaparecer en la medida en que las capacidades caloríficas sean similares.

El término q' es reemplazado por una expresión mejorada de la versión clásica de Arrhenius:

$$q' = QA\rho_F \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right) \quad (3.10)$$

Donde Q es el calor producido por unidad de masa, R es la constante universal de los gases, E_a es la energía de activación por mol y A el factor preexponencial. El último término de esta ecuación $QA\rho_F e^{-\frac{E_a}{RT_0}}$ es el calor perdido en la frontera de la llama a una temperatura T_0 . Por otra parte a altas temperaturas se tiene que:

$$\rho_F e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \ll \rho_F e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

y

$$\rho_0 e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \ll \rho_F e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

De acuerdo a lo anterior el término q' se puede aproximar de la siguiente manera:

$$q' = QA\rho_F e^{-\frac{E_a}{RT}} - QA\rho_0 e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \approx QA\rho_F \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right) \quad (3.11)$$

Así la ecuación de energía se puede escribir como:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + (C_{p_F} - C_{p_{NF}}) D_F \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + QA\rho_F \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right) \quad (3.12)$$

De acuerdo a Pujol et al [1] esta suposición está en concordancia con los resultados obtenidos por simulaciones numéricas.

Además de la ecuación de conservación de energía se va a utilizar la ecuación balance de masa para el combustible $i = F$:

$$\frac{\partial \rho_F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_F v_F)}{\partial z} = r_F$$

Y teniendo en cuenta la ecuación de difusión de masa y el término de generación de masa se tiene la ecuación:

$$\frac{\partial \rho_F}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(D_F \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \right) - A \rho_F \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right) \quad (3.13)$$

Observando el último término de la ecuación (3.12) la temperaturag local se incrementará pero de acuerdo a la ecuación (3.13) el combustible se agotará localmente con el tiempo. Debido al modelo que se está utilizando la temperatura no disminuye ya que no se tienen en cuenta las pérdidas por radiación. La solución en este caso es un **”un frente que se propaga con velocidad constante.”**

En artículos anteriores se han resuelto problemas similares pero no han tenido en cuenta el fenómeno de la difusión como es debido, Pujol et al [1]

A continuación se tiene en cuenta las siguientes definiciones de parámetros:

$$\theta \equiv T \frac{R}{E_a} \quad (3.14)$$

$$t' \equiv t \frac{RQA}{C_p E_a} \quad (3.15)$$

$$r' \equiv r \sqrt{\frac{RQA\rho}{\lambda E_a}} \quad (3.16)$$

$$\rho' \equiv \frac{\rho_F}{\rho} \quad (3.17)$$

$$C \equiv \frac{C_p E_a}{RQ} \quad (3.18)$$

$$\Delta C_p \equiv C_{pF} - C_{pNF} \quad (3.19)$$

$$Le \equiv \frac{\rho D_F C_p}{\lambda} \quad (3.20)$$

Estas equivalencias transforman las ecuaciones (3.12) y (3.13) respectivamente en:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \frac{\partial \theta}{\partial r'} + \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t'} = Le \frac{\partial^2 \rho}{\partial r'^2} - C \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (3.22)$$

Para ver cómo se originan estas dos últimas ecuaciones debemos calcular las siguientes derivadas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t'} &= \frac{\partial \theta}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial t'} = \frac{\partial T}{\partial t} \frac{R}{E_a} \frac{C_p E_a}{RQA} = \frac{\partial T}{\partial t} \frac{C_p}{QA} \\ &\therefore \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{QA}{C_p} \frac{\partial \theta}{\partial t'} \\ \frac{\partial \theta}{\partial r'} &= \frac{\partial \theta}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial r'} = \frac{\partial T}{\partial r} \frac{R}{E_a} \sqrt{\frac{\lambda E_a}{RQA\rho}} \\ &\therefore \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{E_a}{R} \sqrt{\frac{RQA\rho}{\lambda E_a}} \frac{\partial \theta}{\partial r'} \\ \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} &= \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \frac{R}{E_a} \sqrt{\frac{\lambda E_a}{RQA\rho}} \right) \frac{\partial r}{\partial r'} = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \frac{R}{E_a} \sqrt{\frac{\lambda E_a}{RQA\rho}} \sqrt{\frac{\lambda E_a}{RQA\rho}} = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \frac{\lambda}{QA\rho} \\ &\therefore \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = \frac{QA\rho}{\lambda} \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} \\ \frac{\partial \rho'}{\partial r'} &= \frac{\partial \rho'}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial r'} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \sqrt{\frac{\lambda E_a}{RQA\rho}} \\ &\therefore \frac{\partial \rho_F}{\partial r} = \rho \sqrt{\frac{RQA\rho}{\lambda E_a}} \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \\ \frac{\partial \rho'_F}{\partial t'} &= \frac{\partial \rho'_F}{\partial t'} \frac{\partial t}{\partial t'} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho_F}{\partial t} \frac{C_p E_a}{RQA} \\ &\therefore \frac{\partial \rho_F}{\partial t} = \rho \frac{RQA}{C_p E_a} \frac{\partial \rho'}{\partial t'} \end{aligned}$$

Al reemplazar estas ecuaciones en la ecuación (3.12) y (3.13) se obtienen las ecuaciones (3.21) y (3.22).

Los valores utilizados por los investigadores en el trabajo son: $C_{pF} \approx 1.5 kJK^{-1}kg^{-1}$, $C_{pN}F \approx 1 kJK^{-1}kg^{-1}$, $C = 0.5$ y $0 < Le < 0.5$

Las ecuaciones (3.21) y (3.22) fueron resueltas numéricamente para valores de $C = 0.5$ y $\theta_0 = 0.07$. Se utilizaron las condiciones iniciales: $T(r, t = 0)$ para aquellos valores de r tales que $\rho_F(r, t = 0) = \rho_0$. El procedimiento utilizado fue el método de las diferencias finitas.

A continuación se muestran algunos resultados gráficos obtenidos en el método de diferencias finitas, ver figura 3.1

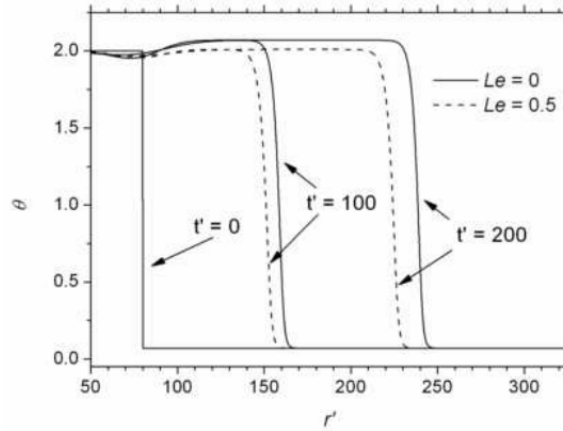


Figura 3.1: *Ejemplo de perfiles de temperatura adimensional obtenido numéricamente resolviendo las ecuaciones (3.21) y (3.22), para $Le = 0$ (líneas sólidas) y $Le = 0,5$ (líneas discontinuas). Al graficar las soluciones se obtienen frentes (se ha despreciado la radiación). Debe observarse que la temperatura máxima obtenida en un frente decrese en la medida en que Le aumenta. Tomado de Pujol et al [1]*

Es importante destacar que el número de Lewis Le tiene mucha importancia en los procesos de combustión en donde se presentan fenómenos de difusión encontrándose que $0 \leq Le \leq 1$, valiendo 0 en el caso en que no hay difusión.

Capítulo 4

Cotas para la propagación del frente de llama

Para esta sección se aplicará el método de cálculo de variaciones para obtener cotas superiores e inferiores para la rapidez del frente de onda Benguria y Dapassier [6]. Fundamentalmente el método está basado en el método de Benguria y Dapassier referenciado en [1]. Incluye el método de la difusión de masa generalizado los cuales pueden ser aplicados a sistemas simples RD. En el artículo los autores Pujol et al reducen el modelo completo, es decir, las ecuaciones (3.21) y (3.22) a una sola ecuación RD en una sola variable simple: la temperatura.

El procedimiento anterior se hace con el objetivo de obtener cotas superiores e inferiores para la velocidad del frente de llama de combustión.

4.1 Modelo RD de combustión de una variable simple

El procedimiento inicialmente busca eliminar la variable ρ' utilizando una relación sencilla entre θ y ρ' . Inicialmente se obtendrá una expresión para la temperatura máxima θ_{max} en el frente de llama. Para lograr esto las expresiones (3.21) y (3.22) desde

$t' = 0$ (antes de que el frente de llama llegue al punto considerado) hasta $t' = \infty$ (después que el frente de llama ha pasado). Las condiciones de frontera son:

$$\theta(t' = \infty) = \theta_{max} \quad \theta(t' = 0) = \theta_0$$

$$\rho'(t' = \infty) = 0 \quad \rho'(t' = 0) = 1$$

Las condiciones anteriores implican que en la región estrecha del frente de llama existen gradientes térmicos y de densidad. Bajo estas suposiciones el término total de flujo de calor se hace despreciable en la ecuación (3.21) y el flujo de difusión de masa en la ecuación (3.22) también se hace despreciable. Por lo anterior las ecuaciones quedan así:

$$\frac{d\theta}{dt'} = \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (4.1)$$

$$\frac{d\rho'}{dt'} = -C\rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (4.2)$$

Dividiendo la (4.1) entre (4.2) y separando variables:

$$\frac{d\theta}{d\rho} = -\frac{1}{C} \quad (4.3)$$

La cuál se integra de acuerdo a las condiciones de frontera:

$$\int_{\theta_0}^{\theta_{max}} d\theta = -\frac{1}{C} \int_1^0 d\rho \quad (4.4)$$

lo cuál nos lleva a la ecuación:

$$\theta_{mas} = \theta_0 + \frac{1}{C} \quad (4.5)$$

La figura 4.1 confirma la validez de las suposiciones hechas y del valor de la temperatura máxima obtenida.

En la gráfica se puede apreciar una gran concordancia tanto para el caso no difusivo como para altos valores de Le . Esta ecuación jugará un papel importante en la deducción de las cotas superiores e inferiores para la velocidad del frente de llama, ya que permitirá definir nuevas variables adimensionales cuyo rango de valores se

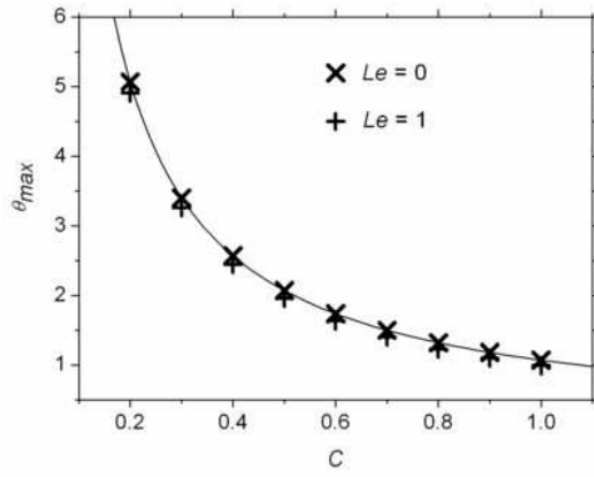


Figura 4.1: Comparación entre los valores obtenidos para θ_{max} utilizando la ecuación (4.5) y los obtenidos por simulación numérica del modelo completo, es decir, con las ecuaciones (3.21) y (3.22), para $Le = 0$ y $Le = 1$. **Tomado de Pujol et al [1]**

encuentran entre 0 y 1. Inicialmente la ecuación (4.5) puede también escribirse en términos de la variable T:

$$T_{max} = T_0 + \frac{Q}{C_p} \quad (4.6)$$

La ecuación anterior es un caso especial de la ecuación de Zeldovich, referenciada en Glasman y Yetter página 160 [6] y Fort et al [7].

$$\rho_0 C_p (T - T_0) = Q(\rho_0 - \rho_F) \quad (4.7)$$

Esta ecuación también puede escribirse en términos de las variables adimensionales θ y ρ' así:

$$\theta - \theta_0 = \frac{1 - \rho'}{C} \quad (4.8)$$

A partir de esta ecuación se puede obtener la ecuación (4.6) cuando t tienda a infinito, T tienda a T máxima y la densidad del combustible tienda a cero. Ahora se obtendrá una expresión en donde no aparezca la variable ρ' . La ecuación 4.8 se puede utilizar ahora para eliminar esta variable de la ecuación (2.21). Primero se calcula la derivada:

$$\frac{\partial \theta}{\partial r'} = -\frac{1}{C} \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \therefore \frac{\partial \rho'}{\partial r'} = -C \frac{\partial \theta}{\partial r'} \rightarrow \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \frac{\partial \theta}{\partial r'} = -C \left(\frac{\partial \theta}{\partial r'} \right)^2$$

y

$$\rho' = 1 - (\theta - \theta_0)C$$

Al reemplazar las expresiones anteriores en la ecuación (3.21) se tiene:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} - Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \left(\frac{\partial \theta}{\partial r'} \right)^2 + [1 - C(\theta - \theta_0)] \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (4.9)$$

Esta expresión es una ecuación RD para la variable θ y que no está acoplada con la densidad. y para obtenerla se utilizó la ecuación de Zeldovich. Seguidamente se utilizó otra variable adimensional adicional:

$$\theta' = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_{max} - \theta_0} \quad 0 \leq \theta' \leq 1 \quad (4.10)$$

Con extremos $\theta' = 0$ cuando $T = T_0$ (temperatura ambiente) y $\theta' = 1$ cuando $T = T_{max}$ (temperatura máxima). Y para las derivadas se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta'}{\partial r'} &= \frac{1}{\theta_{max} - \theta_0} \frac{\partial \theta}{\partial r'} & \therefore & \quad \frac{\partial \theta}{\partial r'} = (\theta_{max} - \theta_0) \frac{\partial \theta'}{\partial r'} \\ \frac{\partial \theta'}{\partial t'} &= \frac{1}{\theta_{max} - \theta_0} \frac{\partial \theta}{\partial t'} & \therefore & \quad \frac{\partial \theta}{\partial t'} = (\theta_{max} - \theta_0) \frac{\partial \theta'}{\partial t'} \\ \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2} &= \frac{1}{(\theta_{max} - \theta_0)} \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} & \therefore & \quad \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} = (\theta_{max} - \theta_0) \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2} \end{aligned}$$

Ahora sustituyendo la ecuación (4.10) en la ecuación (4.9) y teniendo en cuenta que

$$\frac{\partial \theta'}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2} - CLe \left(\frac{\partial \theta'}{\partial r'} \right)^2 + C(1 - \theta') \left(e^{-\frac{1}{\theta_0 + (\theta_{max} - \theta_0)(\theta')}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (4.11)$$

Si hacemos, ahora

$$B = Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \quad (4.12)$$

con $B > 0$ (ya que $C_F > C_{NF}$) y llamando

$$f(\theta') = C[1 - \theta'] \left(e^{-\frac{1}{\theta_0 + (\theta_{max} - \theta_0)(\theta')}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (4.13)$$

tenemos ahora una ecuación de la forma:

$$\frac{\partial \theta'}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2} - B \left(\frac{\partial \theta'}{\partial r'} \right)^2 + f(\theta') \quad (4.14)$$

Debe destacarse que los extremos de la nueva variable adimensional $\theta' = 0$ y $\theta' = 1$ corresponden a los estados estables $f(\theta' = 0)$ y $f(\theta' = 1) = 0$

4.2 Cotas inferiores

Como se puede observar en la figura 2.1 las soluciones de la ecuación (4.14) son frentes viajeros de la forma $\theta'(r' - vt')$ en donde v es su velocidad. A pesar de que hay varios autores que han estudiado las cotas para la velocidad del frente de llama, no hay resultados para el proceso de combustión modelado por la ecuación (4.14). El método que emplearon los autores está basado en la propuesta de Benguria y Dapassier quienes expresan las derivadas parciales de la ecuación (4.14) en términos de la variable $z = r' - vt'$ por lo tanto se tiene:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta'}{\partial t'} &= \frac{\partial r'}{\partial t'} \frac{\partial \theta'}{\partial z} = v \frac{\partial \theta'}{\partial z} \\ \frac{\partial \theta'}{\partial z} &= \frac{\partial \theta'}{\partial r'} \frac{\partial r'}{\partial z} = \frac{\partial \theta'}{\partial r'} 1 = \frac{\partial \theta'}{\partial r'} \\ \frac{\partial^2 \theta'}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2 \theta'}{\partial r'^2}\end{aligned}$$

Con estas consideraciones tenemos por tanto la siguiente expresión:

$$\frac{\partial^2 \theta'}{\partial z^2} + v \frac{\partial \theta'}{\partial z} - B \left(\frac{\partial \theta'}{\partial z} \right)^2 + f(\theta') = 0 \quad (4.15)$$

En los trabajos desarrollados por Benguria y Dapassier se trabajó el caso $B=0$, es decir, la situación en la que no hay difusión. Se trabajará en el espacio de fase $p(\theta') = -\frac{\partial \theta'}{\partial z}$ con $p(0) = 0$, $p(1) = 0$ y $p(\theta') > 0$ en el intervalo $(0,1)$. Además

$$\frac{\partial^2 \theta'}{\partial z^2} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \theta'}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} (-p) = -\frac{\partial p}{\partial \theta'} \frac{\partial \theta'}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial \theta'} (-p) = p \frac{\partial p}{\partial \theta'}$$

.

De esta manera la ecuación (4.15) puede escribirse, en el espacio fase definido, como:

$$p \frac{\partial p}{\partial \theta'} - vp - Bp^2 + f(\theta') = 0 \quad (4.16)$$

Definiendo ahora $g(\theta')$ como una función arbitraria positiva y multiplicando la ecuación anterior por $\frac{g}{p}$ se tiene:

$$\frac{dp}{d\theta'} g - Bpg + \frac{fg}{p} = vp \quad (4.17)$$

Separando variables e integrando sobre el dominio de θ' se llega a:

$$v \int_0^1 g d\theta' = \int_0^1 \left(\frac{fg}{p} - Bgp + g \frac{dp}{d\theta'} \right) d\theta' \quad (4.18)$$

Integrando por partes el último término se tiene:

$$\int_0^1 g \left(\frac{dp}{d\theta'} \right) d\theta' = [pg]_0^1 - \int_0^1 p \left(\frac{dg}{d\theta'} \right) d\theta' = \int_0^1 ph d\theta'$$

Donde

$$h = -\frac{dg}{d\theta'}$$

Reemplazando este resultado en la ecuación (4.18) se obtiene:

$$v \int_0^1 g d\theta' = \int_0^1 \left(\frac{fg}{p} - Bgp + ph \right) d\theta' = \int_0^1 \left(\frac{fg}{p} + p(h - Bg) \right) d\theta' \quad (4.19)$$

La función $g(\theta')$ se selecciona de tal manera que:

$$h - Bg > 0 \quad (4.20)$$

Por otra parte, como p y f la función $g(\theta')$ se selecciona de tal manera que:

$$\frac{fg}{p} + p(h - Bg) \geq 2\sqrt{fg(h - Bg)} \quad (4.21)$$

(Nota: Si $a > 0$ y $b > 0$ entonces $a + b \geq 2\sqrt{ab}$) De aquí que podemos obtener una cota inferior para la velocidad usando las ecuaciones (4.19) y (4.21).

$$v \geq \frac{2 \int_0^1 \sqrt{fg(h - Bg)} d\theta'}{\int_0^1 g d\theta'} \quad (4.22)$$

Es posible ahora dar valores para la cota de la velocidad de la llama utilizando una función de prueba $g(\theta)$ que satisfaga la ecuación (4.20) dentro del rango de los valores asumidos en el artículo por los autores, es decir, $0 \leq B \leq 0.5$, $0 \leq Le \leq 1$ y $\frac{\Delta C_p}{C_p} = 0.5$

$$g(\theta) = (1 - \theta')^n \quad \text{con} \quad 0.5 \leq n \leq 1 \quad (4.23)$$

$$\int_0^1 g(\theta') d\theta' = \int_0^1 (1 - \theta')^n d\theta' = -\frac{1}{n+1} \left((1 - \theta')^{n+1} \right) \Big|_0^1$$

Finalmente obtenemos una ecuación para la cota inferior de la velocidad sustituyendo (4.23) en (4.22):

$$v \geq 2(n+1) \int_0^1 \sqrt{f(1-\theta')^n [-n(1-\theta')^{n-1} - B(1-\theta')^n]} d\theta'$$

$$v \geq 2(n+1) \int_0^1 \sqrt{f(n(1-\theta')^{2n-1} - B(1-\theta')^{2n})} d\theta' \quad (4.24)$$

Para obtener las cotas inferiores se integra la ecuación (4.24) numéricamente para algunos valores de n , por ejemplo $n = 0.5$ y $n = 1$ los cuales son mostrados con los valores que se obtienen a partir de la solución numérica del sistema completo. Los resultados son mostrados en la figura (4.2)

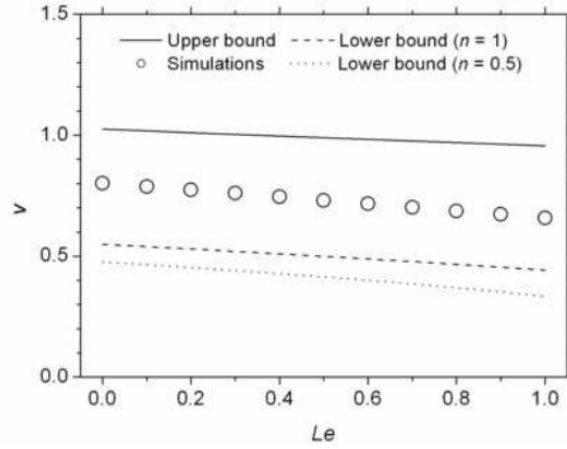


Figura 4.2: *Cotas superiores (línea sólida) y cotas inferiores para dos valores de n (líneas discontinuas) obtenidas estas últimas con (4.24) y además aparecen los valores exactos de v (círculos) obtenidos a partir de la simulación del sistema completo, como funciones del número de Lewis* **Tomado de Pujol et al [1]**

Es importante además que la función de prueba propuesta en el artículo difiere de las funciones propuestas por otros autores.

4.3 Cotas superiores

Para hallar cotas inferiores utilizando el principio variacional debe escogerse primero una función de prueba conveniente. Enseguida se hallará una cota superior utilizando un procedimiento análogo. Se considerará un conjunto de funciones de prueba \hat{g} tales que:

$$\frac{f\hat{g}}{p} = p \left(-\frac{d\hat{g}}{d\theta'} - B\hat{g} \right) \quad (4.25)$$

Esto implica que la igualdad en la ecuación (4.21) se mantiene (ya que $(a - b) \geq 2\sqrt{ab}$).

Despejando $f(\theta')$ de la ecuación (4.16) se tiene:

$$f(\theta') = vp + Bp^2 - p \frac{\partial p}{\partial \theta'} \quad (4.26)$$

La ecuación obtenida se reemplaza ahora en (4.25) como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} \frac{(vp + Bp^2 - p \frac{dp}{d\theta'}) \hat{g}}{p} &= -p \frac{d\hat{g}}{d\theta'} - B\hat{g}p \\ \left(v + Bp - \frac{dp}{d\theta'} \right) \hat{g} &= -p \frac{d\hat{g}}{d\theta'} - B\hat{g}p \\ v\hat{g} + Bp\hat{g} - \frac{dp}{d\theta'} \hat{g} &= -p \frac{d\hat{g}}{d\theta'} - B\hat{g}p \\ v\hat{g} - \frac{dp}{d\theta'} \hat{g} &= -p \frac{d\hat{g}}{d\theta'} - 2B\hat{g}p \end{aligned}$$

Dividiendo ahora por $p\hat{g}$ se obtiene:

$$\frac{v}{p} - \frac{1}{p} \frac{dp}{d\theta'} = -\frac{1}{\hat{g}} \frac{d\hat{g}}{d\theta'} - 2B$$

La cuál al reorganizarla nos queda:

$$\frac{1}{\hat{g}} \frac{d\hat{g}}{d\theta'} - \frac{1}{p} \frac{dp}{d\theta'} = -\frac{v}{p} - 2B \quad (4.27)$$

La cuál puede ser integrada como sigue:

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{\hat{g}} d\hat{g} - \int \frac{1}{p} dp &= -\int \left(\frac{v}{p} + 2B \right) d\theta' \\ \ln \left(\frac{\hat{g}(\theta')}{p(\theta')} \right) - \ln \left(\frac{\hat{g}(\theta'_0)}{p(\theta'_0)} \right) &= -\int \left(\frac{v}{p} + 2B \right) d\theta' \end{aligned}$$

Y finalmente:

$$\frac{\hat{g}(\theta')}{p(\theta')} = \frac{\hat{g}(\theta'_0)}{p(\theta'_0)} \exp \left[- \int_{\theta'_0}^{\theta'} \left(\frac{v}{p} + 2B \right) d\theta' \right] \quad \text{con } 0 < \theta'_0 < 1 \quad (4.28)$$

Para la existencia del conjunto S de todas las funciones de prueba admisibles \hat{g} se requiere de la convergencia de las integrales de la ecuación (4.28) y este hecho fue probado ya por Benguria en los trabajos reseñados por [1], para el caso $B = 0$.

Sinembargo dado el hecho de que $B > 0$ no compromete la convergencia de las integrales. Para hallar la cota superior, se sigue un proceso análogo al propuesto por los autores en la sección anterior. Por tanto se comenzará por multiplicar la ecuación (4.27) por gp y se integra desde $\theta' = 0$ hasta $\theta' = 1$:

$$\begin{aligned} p \frac{dg}{d\theta'} - g \frac{dp}{d\theta'} &= -vg - 2gpB \\ vg &= g \frac{dp}{d\theta'} - p \frac{dg}{d\theta'} - 2gpB \\ vg &= g \frac{dp}{d\theta'} - \underbrace{p \frac{dg}{d\theta'}}_{\frac{fg}{p}} - gpB = g \frac{dp}{d\theta'} + \frac{fg}{p} - gpB \end{aligned}$$

Luego la ecuación anterior puede reescribirse de la siguiente manera:

$$v \int_0^1 g d\theta' = \int_0^1 \left(g \frac{dp}{d\theta'} + \frac{fg}{p} - gpB \right) d\theta'$$

La primera integral del lado derecho se puede desarrollar por partes y obtener:

$$\int_0^1 g \left(\frac{dp}{d\theta'} \right) d\theta' = gp|_0^1 - \int_0^1 p \frac{dg}{d\theta'} d\theta' = \int_0^1 ph d\theta'$$

Así se obtiene la siguiente expresión:

$$v \int_0^1 g d\theta' = \int_0^1 \left(\frac{fg}{p} + p(h - Bg) \right) d\theta' \quad (4.29)$$

Y por un argumento similar dado en la sección anterior se afirma que:

$$\left(\frac{fg}{p} + p(h - Bg) \right) \geq 2\sqrt{fg(h - Bg)} \quad (4.30)$$

De la cuál podemos despejar la velocidad:

$$v = \frac{2 \int_0^1 \sqrt{fg(h - Bg)} d\theta'}{\int_0^1 g d\theta'} \quad (4.31)$$

Para todas las funciones $g \in S$, es decir, todas las funciones de prueba que satisfagan (4.25).

Enseguida se considerará el supremo de la ecuación (4.31) de la siguiente forma:

$$v_* = \sup_g \frac{2 \int_0^1 \sqrt{fg(h - Bg)} d\theta'}{\int_0^1 g d\theta'} \quad (4.32)$$

De manera similar a la ecuación (4.21) se procederá encontrar una cota superior de v_* realizando la consideración:

$$\left(\frac{fg}{\alpha\theta'} + \alpha\theta' \left(-\frac{dg}{d\theta} - Bg \right) \right) \geq 2\sqrt{fg(h - Bg)} \quad (4.33)$$

Con α una constante positiva. Reemplazando este término en la ecuación (4.32) se tiene:

$$v_* \leq \sup_g \frac{\int_0^1 \left(\frac{fg}{\alpha\theta'} + \alpha\theta' \left(-\frac{dg}{d\theta} - Bg \right) \right) d\theta'}{\int_0^1 g d\theta'} \quad (4.34)$$

Ahora bien, si integramos por partes el término $\alpha\theta' \frac{dg}{d\theta}$ y tenemos en cuenta que $g(0) = 0$ y $g(1) = 0$ obtenemos:

$$\begin{aligned} - \int_0^1 \alpha \left(\frac{dg}{d\theta'} \right) d\theta' &= \theta' g|_0^1 + \int_0^1 g d\theta' = \int_0^1 g d\theta' \\ v_* &\leq \sup_g \frac{\int_0^1 g \left(\frac{f}{\alpha} + \alpha - \alpha B\theta \right) d\theta'}{\int_0^1 g d\theta'} \end{aligned} \quad (4.35)$$

Debido a que $\alpha - \alpha B\theta' > 0$ para todos los valores positivos de θ' se puede llegar a la conclusión de que:

$$v_* \leq \sup \left(\frac{f}{\alpha\theta'} + \alpha - \alpha B\theta \right) \quad (4.36)$$

La argumentación sería la siguiente:

$$v_* \leq \sup_g \frac{\int_0^1 g \left(\frac{f}{\alpha} + \alpha - \alpha B\theta \right) d\theta'}{\int_0^1 g d\theta} \leq \sup_g \left[\sup_{[0,1]} \left(\frac{f}{\alpha\theta'} + \alpha - \alpha B\theta \right) d\theta \right] \frac{\int_0^1 g d\theta}{\int_0^1 g d\theta}$$

$$\leq \sup_{[0,1]} \left(\frac{f}{\alpha\theta'} + \alpha - \alpha\theta' \right) d\theta' = \sup \left(\frac{f}{\alpha\theta'} + \alpha - \alpha\theta' \right)$$

Donde $\theta' \in [0, 1]$. Ahora bien, como lo proponen los autores $\alpha = \sup \sqrt{\frac{f}{\theta'}}$ la ecuación (4.36) queda:

$$v_* \leq \sup \left(\frac{f}{\theta' \sup \sqrt{\frac{f}{\theta'}}} + \sup \sqrt{\frac{f}{\theta'}} - \sup \sqrt{\frac{f}{\theta'}} B\theta' \right) \quad (4.37)$$

El resultado obtenido aquí reduce la cotas propuestas por Aronson y Weinberger para la velocidad. Los autores mencionados trabajaron el caso $B=0$ (no difusión) y obtuvieron la ecuación:

$$v_* \leq \sup 2 \sqrt{\frac{f}{\theta'}} \quad (4.38)$$

La ecuación (4.37) se puede resolver por un métodos numéricos para diferentes valores del Le . Los reultados obtenidos también estan mostrados en la figura 4.2. Los valores que se obtienen en esta cota están de acuerdo con los obtenidos por los métodos de simulación numérica aplicados al sistema completo de 2 ecuaciones.

4.4 Pérdidas por radiación: Cotas para la velocidad de propagación de pulsos

Hasta este momento las pérdidas debidas a la radiación fueron despreciadas. Para obtener valores más aproximados a los reales es conveniente tomar en cuenta las pérdidas por radiación. Básicamente se trata de introducir un nuevo término en las ecuaciones del modelo anterior. En la ecuación de energía se contempla ahora el componente de pérdida por radiación de la siguiente manera:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + (C_{pF} - C_{pNF}) \rho_F v_F D_F \frac{\partial \rho_F}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + Q A \rho_F \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} - e^{-\frac{E_a}{RT_0}} \right) - 4a\sigma (T^4 - T_0^4)$$

Donde a es el coeficiente de absorción y σ es la constante de Stefan-Boltzmann.

Nuevamente aplicando aplicando los parámetros y variables adimensionales (con λ y D_F constantes) se vuelve a obtener un sistema de ecuaciones que modelan la llama laminar

premezclada en un espacio radial de coordenadas con pérdidas radiativas.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \frac{\partial \rho}{\partial r'} + \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) - \varepsilon (\theta^4 - \theta_0^4) \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = Le \frac{\partial^2 \rho}{\partial r'^2} - C \rho' \left(e^{\frac{1}{\theta}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (4.40)$$

Con una nueva variable adimensional:

$$\varepsilon = \frac{4a\sigma}{QA\rho} \left(\frac{E_a}{R} \right)^4 \quad (4.41)$$

Las ecuaciones (4.39) y (4.40) se pueden reducir a las ecuaciones (2.21) y (2.22) cuando se desprecian las pérdidas por radiación. El sistema de ecuaciones (4.39) y (4.40) se

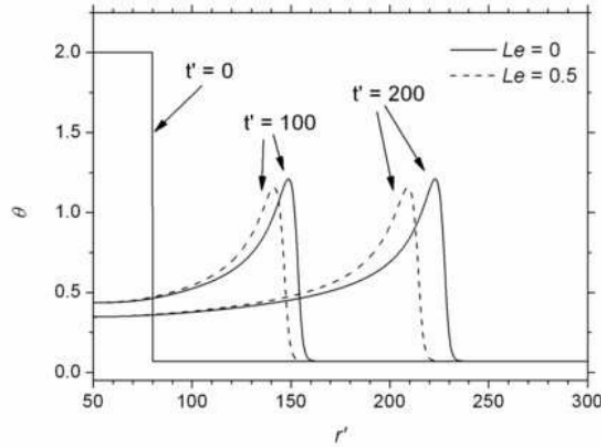


Figura 4.3: *Perfiles de temperatura utilizando las ecuaciones (1.39) y (1.40) la cuál contempla pérdidas de energía por radiación. La solución es una serie de pulsos en lugar de frentes. Se utilizó $C = 0.5$, $\frac{\Delta C_p}{C_p} = 0.5$, $\theta_0 = 0.07$ y $\varepsilon = 0,004$ Tomado de Pujol et al [1]*

resuelve numéricamente para calcular la velocidad de propagación de los pulsos de la velocidad de llama los cuales son mostrados en la figura para $C = 0.5$, $\frac{\Delta C_p}{C_p} = 0.5$, $\theta_0 = 0.07$ y $\varepsilon = 0,004$. Dichos pulsos se van extinguiendo en la medida que se va perdiendo energía por radiación. Cabe también destacar que una de las condiciones necesarias para encontrar los cotas superiores e inferiores es que $\frac{\partial \theta}{\partial z} < 0$ y además, el

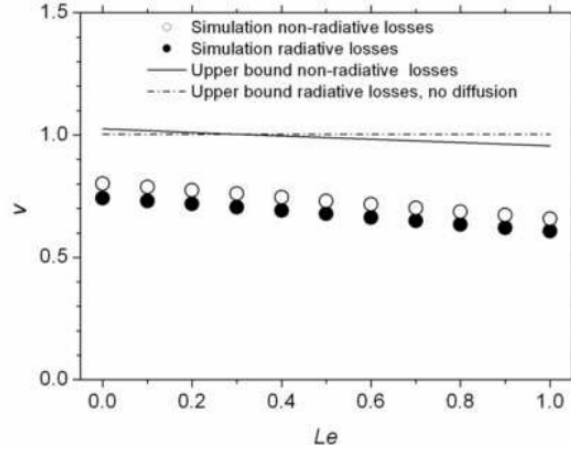


Figura 4.4: Gráfica comparativa la cota superior (círculos negros) representada en la figura 4.2 y el valor exacto de v sin pérdidas radiativas (círculos blancos, como en la figura 4.2) y con pérdidas radiativas (círculos negros). También se muestran (lineas a trazos y puntos) los resultados obtenidos por Fort et al [7] los cuales toman pérdidas radiativas en cuenta, pero ignoran los efectos de difusión. Adicionalmente debe contemplarse el hecho de que los pulsos son más lentos que los frentes ya que se presentan pérdidas por radiación

Tomado de Pujol et al [1]

texto que acompaña dicha ecuación debe cumplirse también. Por lo tanto ninguno de los métodos explicados se aplica para predecir la velocidad de los pulsos en el caso de pérdidas radiativas. No obstante, dado que las pérdidas radiativas disminuirán la velocidad de los pulsos de la llama, podemos usar las mismas cotas superiores e inferiores encontradas en el trabajo de Pujol et al, como se puede apreciar en la figura 4.4

Capítulo 5

Método de elementos finitos

Al igual que el metodo de diferencias finitas, planteado por los autores Pujol et al [1] se propondrá ahora el método de los elementos finitos.

5.1 Residuos Ponderados Método de Galerkin

El sistema a resolver es el siguiente:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \frac{\partial \theta}{\partial r'} + \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = Le \frac{\partial^2 \rho'}{\partial r'^2} - C \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (5.2)$$

Tomando $Le = 0.5$, $C = 0.5$, $\frac{\Delta C_p}{C_p} = 0.5$ y $\theta_0 = 0.07$ se tiene

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + (0.5^2) \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \frac{\partial \theta}{\partial r'} + \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = (0.5) \frac{\partial^2 \rho'}{\partial r'^2} - (0.5) \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (5.4)$$

5.2 Discretización del dominio y polinomios de interpolación

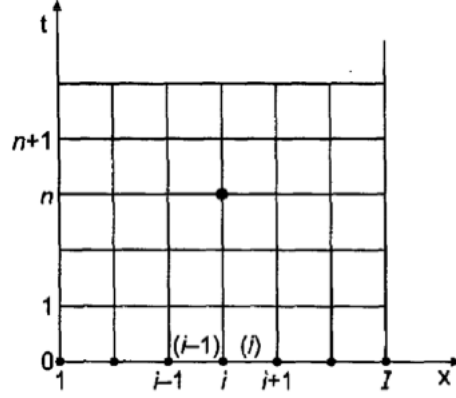


Figura 5.1: Imagen tomada de Numerical methods for engineers and scientists. Hoffman, Joe D. and Frankel, Steven [11].

El espacio físico se discretizará en I nodos y en $I-1$ elementos como se ilustra en la figura 5.1

En el desarrollo del método se denotaron los nodos como $1, 2, \dots, i-1, i, i+1, \dots$ como subíndice y los elementos como super índices $(1), (2), \dots, (i-1), (i), \dots$

De esta manera el elemento (i) comienza en el nodo i y termina en el nodo $i+1$. El largo del elemento (incremento) es $\Delta r_i = r_{i+1} - r_i$ y el incremento del tiempo $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$. Sean ahora $\theta(r, t)$ y $\rho'(r, t)$ las soluciones globales exactas las cuales podemos igualar a la suma de una serie de polinomios interpolantes locales de la forma $\theta^{(i)}(r, t)$ y $\rho'^{(i)}(r, t)$ con $i = 1, 2, \dots, I-1$ los cuales son válidos en cada elemento. De esta manera

$$\begin{aligned} \theta(r, t) &= \theta^{(1)}(r, t) + \dots + \theta^{(i)}(r, t) + \dots + \theta^{(I-1)}(r, t) \\ &= \sum_{i=1}^{I-1} \theta^{(i)}(r, t) \end{aligned} \tag{5.5}$$

$$\begin{aligned}
\rho'(r, t) &= \rho^{(1)}(r, t) + \dots + \rho^{(i)}(r, t) + \dots + \rho^{(I-1)}(r, t) \\
&= \sum_{i=1}^{I-1} \rho^{(i)}(r, t)
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Los polinomios interpolantes locales $\theta^{(i)}(r, t)$ y $\rho^{(i)}(r, t)$ son definidos de la siguiente manera:

$$\theta^{(i)}(r, t) = \theta_i(t)N_i^{(i)}(r) + \theta_{i+1}(t)N_{i+1}^{(i)}(r) \tag{5.7}$$

$$\rho^{(i)}(r, t) = \rho'_i(t)M_i^{(i)}(r) + \rho'_{i+1}(t)M_{i+1}^{(i)}(r) \tag{5.8}$$

Con

$$N_i(r) = -\frac{r - r_{i+1}}{r_{i+1} - r_i} \quad N_{i+1}(r) = \frac{r - r_i}{r_{i+1} - r_i} = \frac{r - r_i}{\Delta r_i}$$

$$M_i(r) = -\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \quad M_{i+1}(r) = \frac{r - r_i}{\Delta r_i}$$

De esta manera los polinomios interpolantes aplicados al nodo i quedan:

$$\theta^{(i)}(r, t) = \theta_i(t) \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1}(t) \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \tag{5.9}$$

$$\rho^{(i)}(r, t) = \rho'_i(t) \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho'_{i+1}(t) \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \tag{5.10}$$

Ahora formamos las funciones residuales

$$R_1(r, t) = \theta_t - \theta_{rr} - 0.5^2 \rho'_r \theta_r - \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \tag{5.11}$$

$$R_2(r, t) = (\rho')'_t - 0.5 \rho'_{rr} + 0.5 \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \tag{5.12}$$

Seguidamente los residuos anteriores se multiplicarán por un conjunto de funciones de peso $W_k(r)$ y V_k ($k = 1, 2, \dots$) respectivamente para luego integrarlas sobre el dominio

$D(r)$ y así obtener un residual integral igualado a cero.

$$I_1(\theta(r, t)) = \int_a^b W \left(\theta_t - \theta_{rr} - 0.5^2 \rho'_r \theta_r - \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \right) dr = 0 \quad (5.13)$$

$$I_2(\rho'(r, t)) = \int_a^b V \left(\rho'_t - 0.5 \rho'_{rr} + 0.5 \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \right) dr = 0 \quad (5.14)$$

Nota: Aunque realmente I_1 y I_2 depende simultáneamente de θ y ρ' .

Los términos $I_1(\theta(r, t))$ y $I_2(\rho'(r, t))$ denotan los residuos integrales ponderados para las funciones $\theta(r, t)$ y $\rho'(r, t)$ respectivamente.

Los términos $-\int W \theta_{rr} dr$ y $-\int V \rho'_{rr} dr$ pueden ser integrados por partes de la siguiente manera

$$-\int_a^b W \theta_{rr} dr = - \left(W \theta_r - \int W_r \theta_r dr \right) = -[W \theta_r]_a^b + \int_a^b W_r \theta_r dr$$

$$\begin{aligned} u &= W & v' &= \theta_{rr} \\ u' &= W_r & v &= \theta_r \end{aligned}$$

Al ensamblar las ecuaciones para los elementos el término $-[W \theta_r]_a^b$ se anula. De esta manera

$$I(\theta(r, t)) = \int_a^b W \theta_t dr + \int_a^b W_r \theta_r dr - 0.5^2 \int_a^b W \rho'_r \theta_r dr - \int_a^b W \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr \quad (5.15)$$

y para la segunda ecuación:

$$-0.5 \int_a^b V \rho'_{rr} dr = -0.5 \left([V \rho'_r]_a^b - \int_a^b V_r \rho'_r dr \right) = 0.5 \int_a^b V_r \rho'_r dr$$

$$\begin{aligned} u &= V & T' &= \theta_{rr} \\ u' &= V_r & T &= \theta_r \end{aligned}$$

Por razones análogas el término $[V \rho'_r]_a^b$ desaparece. Así tendríamos que:

$$I(\rho'(r, t)) = \int_a^b V \rho_t'^{(i)} dr + 0.5 \int_a^b V_r \rho_r'^{(i)} dr + 0.5 \int_a^b V \rho'^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta^{(i)}}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr \quad (5.16)$$

Por otra parte, y de acuerdo a la discretización hecha las funciones residuales integrales puede ser escritas de la siguiente manera:

$$I_1 = I_1(\theta(r, t)) = I^{(1)}(\theta(r, t)) + \dots + I^{(i)}(\theta(r, t)) + \dots + I^{(I-1)}(\theta(r, t)) = 0 \quad (5.17)$$

$$I_2 = I_2(\rho(r, t)) = I^{(1)}(\rho(r, t)) + \dots + I^{(i)}(\rho(r, t)) + \dots + I^{(I-1)}(\rho(r, t)) = 0 \quad (5.18)$$

Luego las ecuaciones 5.13 y 5.14 se pueden escribir para el nodo (i) como

$$\begin{aligned} I^{(i)}(\theta(r, t)) &= \underbrace{\int_{r_i}^{r_{i+1}} W \theta_t^{(i)} dr}_p + \underbrace{\int_{r_i}^{r_{i+1}} W_r \theta_r^{(i)} dr}_q + \underbrace{0.5^2 \int_{r_i}^{r_{i+1}} W \rho_r'^{(i)} \theta_r^{(i)} dr}_s \\ &\quad - \underbrace{\int_{r_i}^{r_{i+1}} W \rho'^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr}_h \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$I^{(i)}(\rho'(r, t)) = \underbrace{\int_{r_i}^{r_{i+1}} V \rho_t'^{(i)} dr}_e + \underbrace{0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} V_r \rho_r'^{(i)} dr}_f + \underbrace{0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} V \rho'^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr}_j \quad (5.20)$$

Ahora bien como $\theta^{(i)}(r, t)$ y $\rho^{(i)}(r, t)$ están definidas por (5.9) y (5.10) tenemos que:

$$\theta_r^{(i)}(r, t) = \theta_r^{(i)} = \theta_i(t) \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1}(t) \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \quad (5.21)$$

$$\rho_r'^{(i)}(r, t) = \rho_r'^{(i)} = \rho_i'(t) \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1}'(t) \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \quad (5.22)$$

$$\theta_t^{(i)}(r, t) = \theta_t^{(i)} = \dot{\theta}_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \dot{\theta}_{i+1} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \quad (5.23)$$

$$\rho_t'^{(i)}(r, t) = \rho_t'^{(i)} = \dot{\rho}_i' \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \dot{\rho}_{i+1}' \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \quad (5.24)$$

Así:

$$I_1 = I^{(i)}(\theta(r, t)) = p + q + s + h \quad (5.25)$$

$$I_2 = I^{(i)}(\rho(r, t)) = e + f + j \quad (5.26)$$

Utilizando el método de los residuos ponderados de Galerkin $W_k = V_k (k = 1, 2, \dots)$ así:

$$W(r) = V(r) = N_i(r) = -\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \quad (5.27)$$

$$W_x = V_x = -\frac{1}{\Delta r_i} \quad (5.28)$$

Para cada una de las integrales se tiene entonces:

$$\begin{aligned} p = \int_{x_i}^{x_{i+1}} W \theta_t^{(i)} dr &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left(\dot{\theta}_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \dot{\theta}_{i+1} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \right) dr \\ &= \frac{\Delta r_i}{6} (2\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_{i+1}) \end{aligned} \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} q = \int_{r_i}^{r_{i+1}} W_r \theta_r^{(i)} dr &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) \left(\theta_i \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right) dr \\ &= \frac{\theta_i - \theta_{i+1}}{\Delta r_i} \end{aligned} \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned}
s &= -0.5^2 \int_{r_i}^{r_{i+1}} W \rho_r'^{(i)} \theta_r^{(i)} dr = -0.5^2 \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left[\rho_i' \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1}' \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left[\theta_i(t) \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1}(t) \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\
&= -0.5^2 \frac{(\rho_i - \rho_{i+1})(\theta_i - \theta_{i+1})}{2\Delta r_i} \\
&= -\frac{1}{8\Delta x_i} (\rho_i - \rho_{i+1})(\theta_i - \theta_{i+1})
\end{aligned} \tag{5.31}$$

$$\begin{aligned}
h &= - \int_{r_i}^{r_{i+1}} W \rho'^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr = - \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left[\rho_i' \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1}' \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left(e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr
\end{aligned} \tag{5.32}$$

Esta integral no se evalúa en un programa de computador por lo tanto se realizará mediante el método de Simpson $\frac{1}{3}$ con $n = 10$. Por lo tanto

$$\begin{aligned}
h \approx n &= \frac{b-a}{3*10} \left[X(a) + 4X\left(a + \frac{b-a}{10}\right) + 2X\left(a + \frac{2}{10}(b-a)\right) \right. \\
&+ 4X\left(a + \frac{3}{10}(b-a)\right) + 2X\left(a + \frac{4}{10}(b-a)\right) \\
&+ 4X\left(a + \frac{5}{10}(b-a)\right) + 2X\left(a + \frac{6}{10}(b-a)\right) \\
&+ 4X\left(a + \frac{7}{10}(b-a)\right) + 2X\left(a + \frac{8}{10}(b-a)\right) \\
&\left. + 4X\left[\left(a + \frac{9}{10}(b-a)\right) + X(b)\right] \right]
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Donde

$$\begin{aligned}
X(r) &= -W(r)\rho^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta^i}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \\
&= -\left(-\frac{r+r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left[\rho_i \left(-\frac{r+r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1} \left(\frac{r+r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left(e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)}} - e^{-\frac{1}{0.07}} \right) \\
e = \int_{r_i}^{r_{i+1}} V \rho_t'^{(i)} dr &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(-\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left[\dot{\rho}_i' \left(-\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \dot{\rho}_{i+1}' \left(\frac{r-r_i}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\
&= \frac{\Delta r_i}{6} (2\dot{\rho}_i + \dot{\rho}_{i+1})
\end{aligned} \tag{5.34}$$

$$\begin{aligned}
f = 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} V_r \rho_r^{(i)} dr &= 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) \left(\rho'_i \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \rho'_{i+1} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right) dr \\
&= \frac{1}{2\Delta r_i} (\rho_i + \rho_{i+1})
\end{aligned} \tag{5.35}$$

$$\begin{aligned}
j = 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} V \rho^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta^{(i)}}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr &= 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left[\rho'_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho'_{i+1} \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left(e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) - \theta_{i+1} \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr
\end{aligned} \tag{5.36}$$

Al igual que la integral h esta operación no se realiza fácilmente en un programa de cálculo simbólico por lo cual procedemos de manera análoga definiendo una función $G(r)$ y aplicamos el método de Simpson $\frac{1}{3}$ con $n = 2$.

$$j = \frac{1}{2} \int W_1(r) \rho'(r, t) \left(e^{-\frac{1}{\theta(r, t)}} - e^{-\frac{1}{0.07}} \right) dr \tag{5.37}$$

$$j \approx o = \frac{b-a}{2 \cdot 12} \left(Y(a) + 4Y \left(a + \frac{b-a}{10} \right) + 2 \left(a + 2\frac{b-a}{10} + \dots \right) \right) \tag{5.38}$$

$$\text{Donde } Y(r) = \frac{1}{2} W_1(r) \rho'(r, t) \left(e^{-\frac{1}{\theta(r, t)}} - e^{-\frac{1}{0.07}} \right).$$

Ahora tomamos

$$W_2(r) = V(r) = N_{i+1}(r) = \frac{r - r_i}{\Delta r_i} \tag{5.39}$$

y reescribimos los residuos integrales ahora como:

$$I^{(i)}(\theta(r, t)) = p_1 + q_1 + s_1 + h_1 \tag{5.40}$$

$$I^{(i)}(\rho'(r, t)) = e_1 + f_1 + o_1 \quad (5.41)$$

Donde tenemos que

$$\begin{aligned} p_1 = \int_{r_i}^{r_{i+1}} W \theta_t^{(i)} dr &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \left[\dot{\theta}_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \dot{\theta}_{i+1} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\ &= \frac{\Delta r_i}{6} (\dot{\theta}_i + 2\dot{\theta}_{i+1}) \end{aligned} \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} q_1 = \int_{r_i}^{r_{i+1}} W_r \theta_r^{(i)} dr &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \left[\theta_i \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\ &= \frac{1}{\Delta r_i} (\theta_i - \theta_{i+1}) \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$\begin{aligned} s_1 &= -\frac{1}{4} \int_{r_i}^{r_{i+1}} W \rho'_r \theta_r dr \\ &= -\frac{1}{4} \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \left[\rho'_i \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \rho'_{i+1} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right] \left[\theta_i \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\ &= -\frac{1}{8\Delta r_i} (\rho'_i - \rho'_{i+1}) (\theta_i - \theta_{i+1}) \end{aligned} \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned}
h_1 \approx n_1 &= - \int_{r_i}^{r_{i+1}} W \rho'^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta^{(i)}}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr \\
&= - \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \left[\rho'_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho'_{i+1} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left(\frac{1}{e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)} - e^{-\frac{1}{\theta_0}}} \right) dr
\end{aligned} \tag{5.45}$$

Realizando nuevamente

$$\begin{aligned}
j_1 &= - \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \left[\rho'_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho'_{i+1} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left(\frac{1}{e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)} - e^{-\frac{1}{\theta_0}}} \right) dr
\end{aligned} \tag{5.46}$$

Esta última integral se evalúa por el método de Simpson $\frac{1}{3}$ con $n = 10$.

De esta manera:

$$\begin{aligned}
j_1 \approx o_1 &= \frac{b-a}{3*10} \left[Y(a) + 4Y\left(a + \frac{b-a}{10}\right) + 2Y\left(a + \frac{2}{10}(b-a)\right) \right. \\
&+ 4Y\left(a + \frac{3}{10}(b-a)\right) + 2Y\left(a + \frac{4}{10}(b-a)\right) \\
&+ 4Y\left(a + \frac{5}{10}(b-a)\right) + 2Y\left(a + \frac{6}{10}(b-a)\right) \\
&+ 4Y\left(a + \frac{7}{10}(b-a)\right) + 2Y\left(a + \frac{8}{10}(b-a)\right) \\
&\left. + 4Y\left[\left(a + \frac{9}{10}(b-a)\right) + Y(b)\right] \right]
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Donde

$$\begin{aligned}
Y(r) &= -W(r)\rho^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta^i}} - e^{\frac{1}{\theta_0}} \right) \\
&= -\left(-\frac{r+r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \left[\rho_i \left(-\frac{r+r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1} \left(\frac{r+r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) \right] \\
&\quad \cdot \left(e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)}} - e^{-\frac{1}{0.07}} \right) \\
e_1 &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} V \rho_t^{(i)} dr = \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{r-r_i}{\Delta r_i} \right) \left[\dot{\rho}'_i \left(-\frac{r-r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \dot{\rho}'_{i+1} \left(\frac{r-r_i}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\
&= \frac{\Delta r_i}{6} (\dot{\rho}'_i + 2\dot{\rho}'_{i+1})
\end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\begin{aligned}
f_1 = 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} V_r \rho_r^{(i)} dr &= 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \left[\rho_i' \left(-\frac{1}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1}' \left(\frac{1}{\Delta r_i} \right) \right] dr \\
&= \frac{1}{2\Delta r_i} (\rho_{i+1}' - \rho_i')
\end{aligned} \tag{5.49}$$

$$\begin{aligned}
o_1 &= 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} V \rho^{(i)} \left(e^{-\frac{1}{\theta^{(i)}}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr \\
&= 0.5 \int_{r_i}^{r_{i+1}} \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \left[\rho_i' \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \rho_{i+1}' \left(\frac{r - r_i}{\Delta r_i} \right) \right]
\end{aligned} \tag{5.50}$$

$$\cdot \left(e^{-\frac{1}{\theta_i \left(-\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right) + \theta_{i+1} \left(\frac{r - r_{i+1}}{\Delta r_i} \right)}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) dr$$

Las ecuaciones (5.19) y (5.40) se denominan ecuaciones elementales de la temperatura θ para el elemento (i) y las ecuaciones (5.20) y (5.41) se denominan ecuaciones elementales de la densidad para el elemento (i) . Las ecuaciones anteriores se pueden escribir como:

$$I_1 = \frac{\Delta r_i}{6} (2\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_{i+1}) + \frac{1}{\Delta r_i} (\theta_i - \theta_{i+1}) - \frac{1}{8\Delta r_i} (\rho_i' - \rho_{i+1}') (\theta_i - \theta_{i+1}) + h = 0 \tag{5.51}$$

$$I_1' = \frac{\Delta r_i}{6} (\dot{\theta}_i + 2\dot{\theta}_{i+1}) + \frac{1}{\Delta r_i} (\theta_i - \theta_{i+1}) - \frac{1}{8\Delta r_i} (\rho_i' - \rho_{i+1}') (\theta_i - \theta_{i+1}) + h_1 = 0 \tag{5.52}$$

$$I_2 = \frac{\Delta r_i}{6} (2\dot{\rho}_i' + \dot{\rho}_{i+1}') + \frac{1}{2\Delta r_i} (\rho_i' - \rho_{i+1}') + j = 0 \tag{5.53}$$

$$I_2' = \frac{\Delta r_i}{6} (\dot{\rho}_i' + 2\dot{\rho}_{i+1}') + \frac{1}{2\Delta r_i} (\rho_{i+1}' - \rho_i') + j_1 = 0 \tag{5.54}$$

Enseguida se ensamblarán las ecuaciones para el nodo i . Primero debe notarse que en general $\Delta r_i = r_{i+1} - r_i \neq \Delta r_{i+1} - r_i$. Además el nodo i del elemento $i - 1$ corresponde al nodo $i + 1$ en el elemento en general

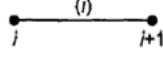


Figura 5.2: Elemento General.

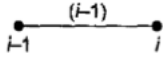


Figura 5.3: Elemento (i-1).

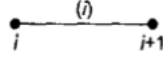


Figura 5.4: Elemento (i).

Las anteriores imagenes fueron tomadas de Numerical Methods for Engineers and Scientists. Hoffman et al [11].

Así para las ecuaciones (5.52) y (5.54) reemplazaremos i por $i - 1$ de la siguiente manera:

$$\frac{\Delta r_-}{6}(\dot{\theta}_{i-1} + 2\dot{\theta}_i) + \frac{1}{\Delta r_-}(\theta_{i-1} - \theta_i) - \frac{1}{8\Delta r_-}(\rho'_{i-1} - \rho'_i)(\theta_{i-1} - \theta_i) + h_1 = 0 \quad (5.55)$$

donde $h_1 = h_1(\theta_i, \theta_{i+1}, \rho'_i, \rho'_{i+1})$.

$$\frac{\Delta r_-}{6}(\dot{\rho}'_{i-1} + 2\dot{\rho}'_i) + \frac{1}{2\Delta r_-}(\rho'_i - \rho'_{i-1}) + j_1 = 0 \quad (5.56)$$

donde $j_1 = j_1(\theta_i, \theta_{i+1}, \rho'_i, \rho'_{i+1})$.

Por otra parte como el elemento general coincide con el elemento (i) las ecuaciones (5.51) y (5.53) quedan respectivamente

$$\frac{\Delta r_i}{6}(2\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_{i+1}) + \frac{1}{\Delta r_i}(\theta_i - \theta_{i+1}) - \frac{1}{8\Delta r_i}(\rho'_i - \rho'_{i+1})(\theta_i - \theta_{i+1}) + h = 0 \quad (5.57)$$

$$\frac{\Delta r_i}{6}(2\dot{\rho}'_i + \dot{\rho}'_{i+1}) + \frac{1}{2\Delta r_i}(\rho'_i - \rho'_{i+1}) + j = 0 \quad (5.58)$$

Tomando $\Delta r_- = \Delta r_+ = \Delta r$ y sumando las ecuaciones (5.55) y (5.57) por una parte y (5.56) y (5.58) por otra, se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta r}{6}(\dot{\theta}_{i-1} + 2\dot{\theta}_i) + \frac{1}{\Delta r}(\theta_{i-1} - \theta_i) - \frac{1}{8\Delta r}(\rho'_{i-1} - \rho'_i)(\theta_{i-1} - \theta_i) + h_1 \\ & + \frac{\Delta r}{6}(2\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_{i+1}) + \frac{1}{\Delta r}(\theta_i - \theta_{i+1}) - \frac{1}{8\Delta r}(\rho'_i - \rho'_{i+1})(\theta_i - \theta_{i+1}) + h = 0 \end{aligned} \quad (5.59)$$

$$\frac{\Delta r}{6}(\dot{\rho}'_{i-1} + 2\dot{\rho}'_i) + \frac{1}{2\Delta r}(\rho'_i - \rho'_{i-1}) + j_1 + \frac{\Delta r}{6}(2\dot{\rho}'_i + \dot{\rho}'_{i+1}) + \frac{1}{2\Delta r}(\rho'_i - \rho'_{i+1}) + j = 0 \quad (5.60)$$

Multiplicando las ecuaciones anteriores por $\frac{6}{\Delta r}$, obtenemos:

$$\begin{aligned} & (\dot{\theta}_{i-1} + 2\dot{\theta}_i) + \frac{6}{(\Delta r)^2}(\theta_{i-1} - \theta_i) - \frac{3}{4(\Delta r)^2}(\rho'_{i-1} - \rho'_i)(\theta_{i-1} - \theta_i) + \frac{6}{\Delta r}h_1 \\ & + (2\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_{i+1}) + \frac{6}{(\Delta r)^2}(\theta_i - \theta_{i+1}) - \frac{3}{4(\Delta r)^2}(\rho'_i - \rho'_{i+1})(\theta_i - \theta_{i+1}) + \frac{6}{\Delta r}h = 0 \end{aligned} \quad (5.61)$$

$$(\dot{\rho}'_{i-1} + 2\dot{\rho}'_i) + \frac{3}{(\Delta r)^2}(\rho'_i - \rho'_{i-1}) + \frac{6}{\Delta r}j_1 + (2\dot{\rho}'_i + \dot{\rho}'_{i+1}) + \frac{3}{(\Delta r)^2}(\rho'_i - \rho'_{i+1}) + \frac{6}{\Delta r}j = 0 \quad (5.62)$$

Simplificando las ecuaciones anteriores:

$$\begin{aligned} & (\dot{\theta}_{i-1} + 4\dot{\theta}_i + \dot{\theta}_{i+1}) + \frac{6}{(\Delta r)^2}(\theta_{i-1} - \theta_{i+1}) - \frac{3}{4(\Delta r)^2}((\rho'_{i-1} - \rho'_i)(\theta_{i-1} - \theta_i) + (\rho'_i - \rho'_{i+1})(\theta_i - \theta_{i+1})) \\ & + \frac{6}{\Delta r}(h_1 + h) = 0 \end{aligned} \quad (5.63)$$

$$(\dot{\rho}'_{i-1} + 4\dot{\rho}'_i + \dot{\rho}'_{i+1}) - \frac{3}{(\Delta r)^2}(\rho'_{i-1} - 2\rho'_i + \rho'_{i+1}) + \frac{6}{\Delta r}(j_1 + j) = 0 \quad (5.64)$$

A continuación se realiza una aproximación en diferencias finitas para las derivadas respecto al tiempo, utilizando diferencias finitas hacia adelante.

$$\dot{f}^n = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t}$$

Así

$$\begin{aligned} \dot{\theta}^n &= \frac{\theta^{n+1} - \theta^n}{\Delta t} \implies \theta^{n+1} = \dot{\theta}^n \Delta t + \theta^n \\ \theta_{i-1}^{n+1} + 4\theta_i^{n+1} + \theta_{i+1}^{n+1} &= \theta_{i-1}^n + 4\theta_i^n + \theta_{i+1}^n + \frac{6\Delta t}{(\Delta r)^2}(\theta_{i-1}^n - \theta_{i+1}^n) \\ - \frac{3}{4(\Delta r)^2}[(\rho_{i-1}'^n - \rho_i'^n)(\theta_{i-1}^n - \theta_i^n) + (\rho_i'^n - \rho_{i+1}'^n)(\theta_i^n - \theta_{i+1}^n)] - \Delta t(h_1^n + h^n) &= 0 \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$\rho_{i-1}^{m+1} + 4\rho_i^{m+1} + \rho_{i+1}^{m+1} = \rho_{i-1}^m + 4\rho_i^m + \rho_{i+1}^m + \frac{6\Delta t}{(\Delta r)^2}(\rho_{i-1}^m - 2\rho_i^m + \rho_{i+1}^m) + \Delta t(j_1^n + j^n) = 0 \quad (5.66)$$

5.3 Elementos finitos sin radiación.

Estas dos últimas ecuaciones son las ecuaciones nodales las cuales nos permiten hacer las iteraciones y así resolver el sistema.

Llamaremos bt_i a la parte derecha de la ecuación (5.65) y bd_i a la parte derecha de la ecuación (5.66), así:

$$\begin{aligned}
 bt_i &= \theta_{i-1}^n + 4\theta_i^n + \theta_{i+1}^n + \frac{6\Delta t}{(\Delta r)^2}(\theta_{i-1}^n - \theta_{i+1}^n) \\
 &- \frac{3}{4(\Delta r)^2}[(\rho_{i-1}'^n - \rho_i'^n)(\theta_{i-1}^n - \theta_i^n) + (\rho_i'^n - \rho_{i+1}'^n)(\theta_i^n - \theta_{i+1}^n)] - \Delta t(h_1^n + h^n) = 0
 \end{aligned} \tag{5.67}$$

$i = 2, 3, 4$.

$$bd_i = \rho_{i-1}'^n + 4\rho_i'^n + \rho_{i+1}'^n + \frac{6\Delta t}{(\Delta r)^2}(\rho_{i-1}'^n - 2\rho_i'^n + \rho_{i+1}'^n) + \Delta t(j_1^n + j^n) = 0 \tag{5.68}$$

$i = 2, 3, 4$.

Para $\Delta r = 100$ y $\Delta t = 50$ con las condiciones iniciales mostradas en la tabla 5.3.

$$\begin{aligned}
 bt_2 &= 2 + 4(0,07) + 0,07 + \frac{6 \times 5}{(100)^2}(2 - 0,07) - \frac{3}{4(100)^2}[(0 - 1)(2 - 0,07) + (1 - 1)(0,07 - 0,07)] \\
 &- 50(0 + (-0,02))\frac{6}{100} = 2,5
 \end{aligned}$$

$$bd_2 = 0 + 4 \cdot 1 + 1 + \frac{6 \cdot 50}{100^2}(0 - 2 \cdot 1 + 1) - 50(0,0097) \cdot \frac{6}{100} = 4,9$$

Sin radiación $\epsilon = 0$ por elementos finitos

θ_1^0	θ_2^0	θ_3^0	θ_4^0	θ_5^0
2	0,07	0,07	0,07	0,07
0	1	1	1	1
$\rho_1'^0$	$\rho_2'^0$	$\rho_3'^0$	$\rho_4'^0$	$\rho_5'^0$

Table 5.1: Valores iniciales para la temperatura y la densidad adimensionales

θ_1^1	θ_2^1	θ_3^1	θ_4^1	θ_5^1
2	0,11	0,06	0,07	0,07
0	0.98	0.97	1.1	1
ρ_1^1	ρ_2^1	ρ_3^1	ρ_4^1	ρ_5^1

Table 5.2: Valores para la primera iteración de la temperatura y densidad adimensionales

Con $t' = 0$, $\Delta r = 100$, $\Delta t = 50$ y

$$bt_2 = 2.5 \quad bd_2 = 4.9$$

$$bt_3 = 0.42 \quad bd_2 = 6$$

$$bt_3 = 0.42 \quad bd_2 = 6$$

$$4\theta_2^1 + \theta_3^1 = 2.5 - 2$$

$$\theta_3^1 + 4\theta_4^1 + \theta_5^1 = 0.42$$

$$\theta_4^1 + \theta_5^1 = 0.42 - 0.07$$

$$4\rho_2^1 + \rho_3^1 = 4.9$$

$$\rho_3^1 + 4\rho_4^1 + \rho_5^1 = 6$$

$$\rho_4^1 + 4\rho_5^1 = 6 - 1$$

De manera análoga se procede a llenar la siguiente tabla:

t'	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5
	ρ'_1	ρ'_2	ρ'_3	ρ'_4	ρ'_5
0	2	0,07	0,07	0,07	0,07
	0	1	1	1	1
1	2	0,11	0,06	0,07	0,07
	0	0,98	0,97	1.1	1
2	2	0,14	0,05	0,07	0,07
	0	0,95	1	1	1
3	2	0,16	0,05	0,08	0,07
	0	0,92	0,99	1	1
4	2	0,19	0,05	0,09	0,07
	0	0,87	0,99	1	1

Table 5.3: Perfil de velocidad para un frente de llama con radiación $\epsilon = 0,4$ y $Le = 0,5$.

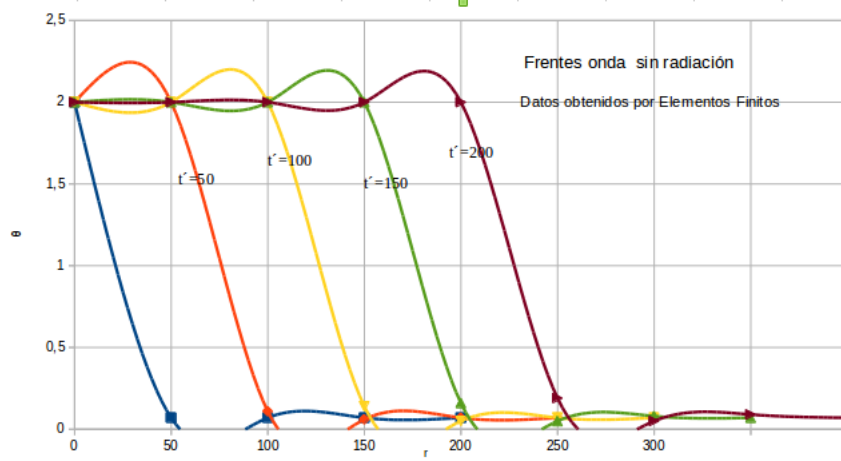


Figura 5.5: Perfiles de θ vs. r para una llama sin radiación.

5.4 Elementos finitos con radiación.

A continuación se hará una comparación para una llama con radiación ($\epsilon = 0,04$), $\Delta r = 30$, $\Delta t = 1$ y valores de $Le = 0,5$ y $Le = 0$.

A diferencia del procedimiento anterior se adicionará el término $\varepsilon(\theta^4 - \theta_0^4)$ el cual corresponde a perdidas por radiación. Los resultados se muestran a continuación:

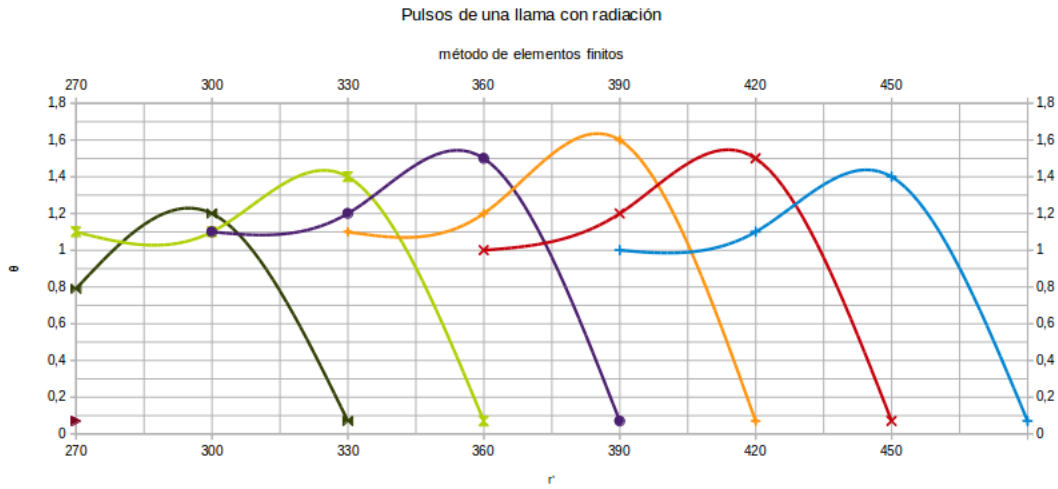


Figura 5.6: Perfiles de θ vs. r para una llama sin radiación.

No hay una diferencia apreciable entre $Le = 0$ y $Le = 0,5$ cuando $\Delta t = 1$ y $\Delta r = 30$. Finalmente se expone el perfil de temperaturas con radiación con el método de diferencias finitas.

t	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5
	ρ'_1	ρ'_2	ρ'_3	ρ'_4	ρ'_5
0	0,07	2	0,07	0,07	0,07
	0	0	1	1	1
1	0,07	1,8	-0,39	0,19	0,07
	0	0,11	1,3	0,93	1
2	0,07	1,6	-0,2	0,31	0,07
	0	0,08	1,2	0,86	1
3	0,07	1,5	-0,003	0,46	0,07
	0	0,06	1,1	0,76	1
4	0,07	1,4	0,22	0,65	0,07
	0	0,07	0,93	0,62	1
5	0,07	1,3	0,48	0,89	0,07
	0	0,09	0,74	0,44	1
6	0,07	1,2	0,79	1,2	0,07
	0	0,11	0,52	0,22	1
7	0,07	1,1	1,1	1,4	0,07
	0	0,15	0,25	-0,04	1
8	0,07	1,1	1,2	1,5	0,07
	0	0,19	-0,02	-0,29	1
9	0,07	1,1	1,2	1,6	0,07
	0	0,23	-0,27	-0,53	1
10	0,07	1	1,2	1,5	0,07
	0	0,27	-0,52	-0,77	1
11	0,07	1	1,1	1,4	0,07
	0	0,31	-0,78	-1	1

Table 5.4: Perfil de velocidad para un frente de llama con radiación $\Delta r = 30$, $\Delta t = 1$ y $Le = 0,5$

t	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5
	ρ'_1	ρ'_2	ρ'_3	ρ'_4	ρ'_5
0	0,07	2	0,07	0,07	0,07
	0	0	1	1	1
1	0,07	1,67	-0,36	0,18	0,07
	0	-0,11	1,3	0,93	1
2	0,07	1,5	-0,18	0,3	0,07
	0	-0,11	1,2	0,85	1
3	0,07	1,4	0,02	0,45	0,07
	0	-0,10	1	0,73	0,07
4	0,02	1,3	0,21	0,63	0,07
	0	-0,10	0,93	0,57	1
5	0,07	1,2	0,5	0,86	0,07
	0	-0,1	0,72	0,37	1
6	0	1,1	0,77	1,1	0,07
	0	0	0,48	0,13	1
7	0	1	1	1,3	0,07
	0	0,1	0,19	-0,13	1
8	0	0,94	1,2	1,4	0,07
	0	0,16	-0,11	-0,39	1
9	0,07	0,91	1,2	1,5	0,07
	0	0,21	-0,39	-0,65	1
10	0,07	0,89	1,2	1,5	0,07
	0	0,26	-0,64	-0,89	1
11	0,07	0,87	1,2	1,4	0,07
	0	0,31	-0,9	-1,1	1

Table 5.5: Perfil de velocidad para un frente de llama con radiación $\Delta r = 30$, $\Delta t = 1$ y $Le = 0$.

5.5 Diferencias Finitas vs Elementos Finitos.

Los detalles de la solución numérica de las ecuaciones de conservación deberán ser ahora explorados. Sin pérdida de generalidad, se puede volver al modelo matemático unidimensional desarrollado en el capítulo 3.

Estas ecuaciones de conservación tienen la forma:

$$\underbrace{\frac{\partial f}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = A \underbrace{\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}}_{\text{difusión}} + B \underbrace{\frac{\partial f}{\partial z}}_{\text{convección}} + \underbrace{C}_{\text{reacción}}$$

Estas derivadas son aproximadas por el uso correspondiente a las de una interpolación parabólica que está determinada por los puntos z_{l-1}, z_l, z_{l+1}

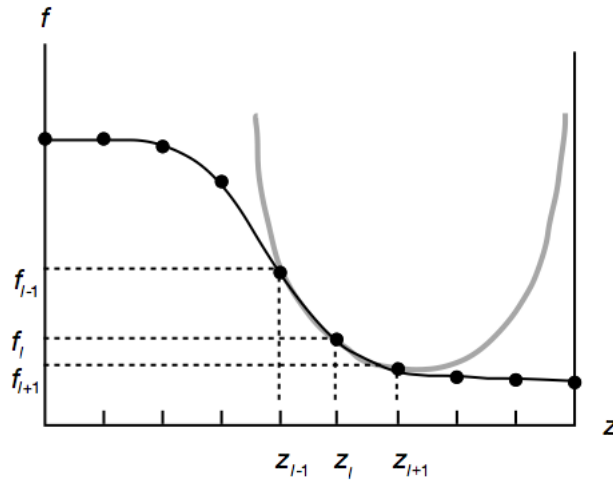


Figura 5.7: Aproximación parabólica $f = az^2 + bz + c$.

$$f_{l+1} = a_l z_{l+1}^2 + b_l z_{l+1} + c_l \quad (5.69)$$

$$f_l = a_l z_l^2 + b_l z_l + c_l \quad (5.70)$$

$$f_{l-1} = a_l z_{l-1}^2 + b_l z_{l-1} + c_l \quad (5.71)$$

Δz no requiere ser uniforme.

$$\Delta z = z_{l+1} - z_l \quad \alpha = \frac{\Delta z_l}{\Delta z_{l-1}} = \frac{z_{l+1} - z_l}{z_l - z_{l-1}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = 2az + b \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = 2a$$

Hallemos a_l y b_l . Despejando c_l de las ecuaciones (5.69) y (5.70) e igualando, obtenemos

$$f_{l+1} - a_l z_{l+1}^2 - b_l z_{l+1} = f_l - a_l z_l^2 - b_l z_l$$

$$W = \begin{vmatrix} z_{l+1}^2 & z_{l+1} & 1 \\ z_l^2 & z_l & 1 \\ z_{l-1}^2 & z_{l-1} & 1 \end{vmatrix} = z_l^2 \Delta z_{l-1} \Delta z_l + z_{l-1}^2 \Delta z_l + z_{l+1}^2 \Delta z_{l-1}$$

$$W_1 = \begin{vmatrix} f_{l+1} & z_{l+1} & 1 \\ f_l & z_l & 1 \\ f_{l-1} & z_{l-1} & 1 \end{vmatrix} = f_{l+1}(z_l - z_{l-1}) - f_l(z_{l+1} - z_{l-1}) + f_{l-1}(z_{l+1} - z_l)$$

$$\frac{W_1}{\Delta z_{l-1}} = \frac{f_{l+1} \Delta z_{l-1} - f_l [\Delta z_l + \Delta z_{l-1}] + f_{l-1} \Delta z_l}{\Delta z_{l-1}}$$

$$= f_{l+1} - f_{l+1}[\alpha + 1] + \alpha f_{l-1}$$

$$W_2 = \begin{vmatrix} z_{l+1}^2 & f_{l+1} & 1 \\ z_l^2 & f_l & 1 \\ z_{l-1}^2 & f_{l-1} & 1 \end{vmatrix} = -f_{l+1}(z_l + z_{l-1}) \Delta z_{l-1} + f_l(z_{l+1} + z_{l-1})(\Delta z + \Delta z_{l-1}) - f_{l-1}(z_{l+1} + z_l) \Delta z_l$$

$$\frac{W_2}{\Delta z_{l-1}} = -f_{l+1}(z_l + z_{l-1}) + f_l(z_{l+1} + z_{l-1})(\alpha + 1) - f_{l-1}(z_{l+1} + z_l)\alpha$$

$$a_l = \frac{\frac{W_1}{\Delta z_{l-1}}}{\frac{W}{\Delta z_{l-1}}} = \frac{f_{l+1} - f_l(\alpha + 1) + f_{l-1}\alpha}{\Delta z^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)}$$

$$b_l = \frac{\frac{W_2}{\Delta z_{l-1}}}{\frac{W}{\Delta z_{l-1}}} = \frac{-f_{l+1}(z_l + z_{l-1}) + f_l(z_{l+1} + z_{l-1})(\alpha - 1) - f_{l-1}(z_{l+1} + z_l)\alpha}{\Delta z^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)}$$

Como

$$\frac{\partial f}{\partial z} = 2az + b$$

En f_{l+1}

$$f_{l+1} = \frac{2z_l - (z_l + z_{l-1})}{\Delta z} = \frac{z_l - z_l}{\Delta z} = \frac{\Delta z_{l-1}}{\Delta z} = \frac{1}{\alpha}$$

En f_l :

$$f_l = \frac{(\alpha + 1)2z_l + z_{l+1} + z_{l-1}}{\Delta z} = (\alpha + 1)\frac{\Delta z_l - \Delta z_{l-1}}{\Delta z} = \left(\alpha - \frac{1}{\alpha}\right)$$

En f_{l-1} :

$$f_{l-1} = \frac{2\alpha z_l - z_{l+1} - z_l}{\Delta z} = \alpha \frac{z_l - z_{l+1}}{\Delta z} = -\alpha$$

Luego

$$\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_l = \frac{\frac{1}{\alpha}f_{l+1} + \left(\alpha - \frac{1}{\alpha}\right)f_l - \alpha f_{l-1}}{\Delta z \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)}$$

y como $\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = 2a = 2$, entonces

$$\frac{f_{l+1} - (1 + \alpha)f_l + \alpha f_{l-1}}{\Delta z^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)}$$

Realizando algunas operaciones

$$\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_l = \frac{\Delta z_{l-1} \frac{f_{l+1} - f_l}{\Delta z_l} + \Delta z_l \frac{f_l - f_{l-1}}{\Delta z_{l-1}}}{\Delta z_l - \Delta z_{l-1}} \quad (5.72)$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)_l = \frac{\frac{f_{l+1} - f_l}{\Delta z_l} - \frac{f_l - f_{l-1}}{\Delta z_{l-1}}}{\frac{1}{2}(\Delta z_l - \Delta z_{l-1})} \quad (5.73)$$

Finalmente tomando $\Delta z_l = \Delta z_{l-1}$ las ecuaciones anteriores se reducen a:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)_l &= \frac{f_{l+1} - f_l}{\Delta z} \\ \left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)_l &= \frac{f_{l+1} - 2f_l + f_{l-1}}{\Delta z_l} \end{aligned}$$

En el caso de las derivadas que se estan manejando se tendría:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial t} &= \frac{\theta_l^{(n+1)} - \theta_l^n}{\Delta t} & \frac{\partial \rho'}{\partial t} &= \frac{\rho_l'^{(n+1)} - \rho_l'^n}{\Delta t} \\ \frac{\partial \theta}{\partial r} &= \frac{\theta_{l+1} - \theta_{l-1}}{\Delta r} & \frac{\partial \rho'}{\partial r} &= \frac{\rho_{l+1}' - \rho_{l-1}'}{\Delta r} \\ \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} &= \frac{\theta_{l+1} - 2\theta_l + \theta_{l-1}}{(\Delta r)^2} & \frac{\partial^2 \rho'}{\partial r^2} &= \frac{\rho_{l+1}' - 2\rho_l' + \rho_{l-1}'}{(\Delta r)^2} \end{aligned}$$

Reemplazando en las ecuaciones 15 y 16 del artículo

$$\begin{aligned} \frac{\theta_{i+1}^n - \theta_{i-1}^n}{\Delta t} &= \frac{\theta_{i+1}^{n-1} - 2\theta_i^{n-1} + \theta_{i-1}^{n-1}}{(\Delta r)^2} + Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \left(\frac{\rho_{i+1}^m - \rho_{i-1}^m}{\Delta r} \right) \left(\frac{\theta_{i+1}^n - \theta_{i-1}^n}{\Delta r} \right) \\ &+ \rho_i^n \left(e^{-\frac{1}{\theta_i^n}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \end{aligned} \quad (5.74)$$

$$\frac{\rho_{i+1}^m - \rho_{i-1}^m}{\Delta t} = Le \frac{\rho_{i+1}^m - \rho_i^m + \rho_{i-1}^m}{(\Delta r)^2} - C \rho_i' \left(e^{-\frac{1}{\theta_i}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (5.75)$$

Despejando θ_{i+1}^n y ρ_{i+1}^m de las ecuaciones anteriores

$$\begin{aligned}
\theta_{i+1}^n &= \left[\frac{\theta_{i+1}^{n-1} - 2\theta_i^{n-1} + \theta_{i-1}^{n-1}}{(\Delta r)^2} + Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \left(\frac{\rho'_{i+1}^n - \rho'_{i-1}^n}{\Delta r} \right) \left(\frac{\theta_{i+1}^n - \theta_{i-1}^n}{\Delta r} \right) \right. \\
&\quad \left. + \rho_i^n \left(e^{-\frac{1}{\theta_i^n}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \right] \Delta t + \theta_{i-1}^n
\end{aligned} \tag{5.76}$$

$$\rho'_{i+1}^n = \left[Le \frac{\rho'_{i+1}^n - \rho'_i{}^n + \rho'_{i-1}^n}{(\Delta r)^2} - C \rho'_i \left(e^{-\frac{1}{\theta_i^n}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \right] \Delta t + \rho'_{i-1}^n \tag{5.77}$$

Tomando como condiciones iniciales $n = 0$

θ	θ_{10}	θ_{20}	θ_{30}	θ_{40}	θ_{50}
	2	0,07	0,07	0,07	0,07
ρ	0	1	1	1	1
	ρ'_1	ρ'_2	ρ'_3	ρ'_4	ρ'_5

Table 5.6: Perfil de velocidad para un frente de llama con radiación $\epsilon = 0$ y $Le = 0,5$.

Tomando $\Delta t = 5$, $\Delta r = 10$, $Le = 0,5$, $C = 0,5$, $\frac{\Delta C_p}{C_p} = 0,5$ y $\theta_0 = 0,07$ Además no hay radiación

$$\begin{aligned}
\theta_{11} &= \left[\frac{0,07 - 2(0,07) + 2}{(10)^2} + (0,5)(0,5^3) \left(\frac{1-0}{10} \right) \left(\frac{0,07-2}{10} \right) \right. \\
&\quad \left. + 1 \left(e^{-\frac{1}{0,07}} - e^{-\frac{1}{0,07}} \right) \right] 5 + 2 = 0,160468 \cong 0,1605
\end{aligned} \tag{5.78}$$

$$\rho'_{11} = \left[0,5 \frac{1 - 2 \cdot 1 - 0}{(10)^2} - 0,5 \cdot 1 \left(e^{-\frac{1}{0,07}} - e^{-\frac{1}{0,07}} \right) \right] 5 + 1 = 0,975 \tag{5.79}$$

Ahora es posible construir la siguiente tabla en donde los términos temperatura y densidad se refieren a las cantidades temperatura adimensional θ y densidad adimensional ρ'

	x	0	10	20	40	50
Tiempo	Temperatura	2	0,07	0,07	0,07	0,07
	Densidad	0	1	1	1	1
10	Temperatura	2	0,16649853	0,07	0,07	0,067375
	Densidad	0	0,975	1	1	0,975
15	Temperatura	2	0,24123155	0,07479477	0,06986957	0,0650112
	Densidad	0	0,94524606	0,999375	0,999375	0,95125065
20	Temperatura	2	0,37164533	0,08275908	0,06987871	0,0628744
	Densidad	0	0,8854452	0,99801944	0,99817193	0,92867348
25	Temperatura	2	0,71503434	0,09615963	0,07018968	0,06095046
	Densidad	0	0,71605096	0,99519883	0,9964307	0,90719527
30	Temperatura	2	1,60882793	0,12369327	0,07106507	0,05923664
	Densidad	0	0,26304199	0,98817672	0,99416895	0,88674752
35	Temperatura	2	2,23735205	0,18278491	0,07318752	0,0577468
	Densidad	0	-0,07860508	0,96943812	0,99133324	0,86726565
40	Temperatura	2	1,84936754	0,27148039	0,07805772	0,05653583
	Densidad	0	0,07524492	0,93358891	0,98768284	0,84868699
45	Temperatura	2	1,97691823	0,4378253	0,08689127	0,05574628
	Densidad	0	-0,01472011	0,8548205	0,98285039	0,83094599
50	Temperatura	2	1,84004434	0,90908366	0,10304103	0,0555812
	Densidad	0	0,02957696	0,61857356	0,97582889	0,81397122
55	Temperatura	2	1,87894033	1,92429931	0,13918003	0,05642953
	Densidad	0	0,00062175	0,09802238	0,96270381	0,79766962
60	Temperatura	2	1,88899429	2,10333056	0,21160807	0,05941803
	Densidad	0	0,00212833	-0,02853438	0,93513831	0,78185494
65	Temperatura	2	1,91149214	1,88977818	0,31932418	0,06652791
	Densidad	0	-0,00182524	0,04066736	0,88649238	0,76614177
70	Temperatura	2	1,90936715	1,91444699	0,56213529	0,07937855
	Densidad	0	0,00198703	0,00085808	0,76560687	0,74999762
75	Temperatura	2	1,92003649	1,83626249	1,23466959	0,10493748
	Densidad	0	-0,00103318	0,01873265	0,42297763	0,73163275
80	Temperatura	2	1,91673891	1,86107139	2,13372086	0,16296876
	Densidad	0	0,00102115	0,00117844	-0,04985537	0,70549376
85	Temperatura	2	1,92114679	1,88079211	1,8505942	0,25965678
	Densidad	0	-0,00051557	-0,00182277	0,0483075	0,6651584
90	Temperatura	2	1,92154264	1,8759015	1,89974514	0,39802064
	Densidad	0	0,00023053	0,00214086	-0,00787636	0,59776699
95	Temperatura	2	1,92386513	1,88565919	1,78919921	0,69532415
	Densidad	0	-5,997E-005	-0,00129795	0,01914726	0,44652905
100	Temperatura	2	1,92555539	1,87889547	1,78741023	1,24561877
	Densidad	0	5,0987E-006	0,00115322	0,00194814	0,15971186
110	Temperatura	2	1,92695805	1,88003724	1,7692067	1,56827803
	Densidad	0	2,6091E-005	-0,00054881	0,0030889	-0,02712857

Tabla 5.6: Frente de llama para $Le = 0,5$ sin radiación $\Delta t = 5$, $\Delta r = 10$, $\frac{\Delta C_p}{C_p} = 0,5$ y $\theta_0 = 0,07$. Curvas para $t' = 35$, $t' = 60$ y $t' = 85$.

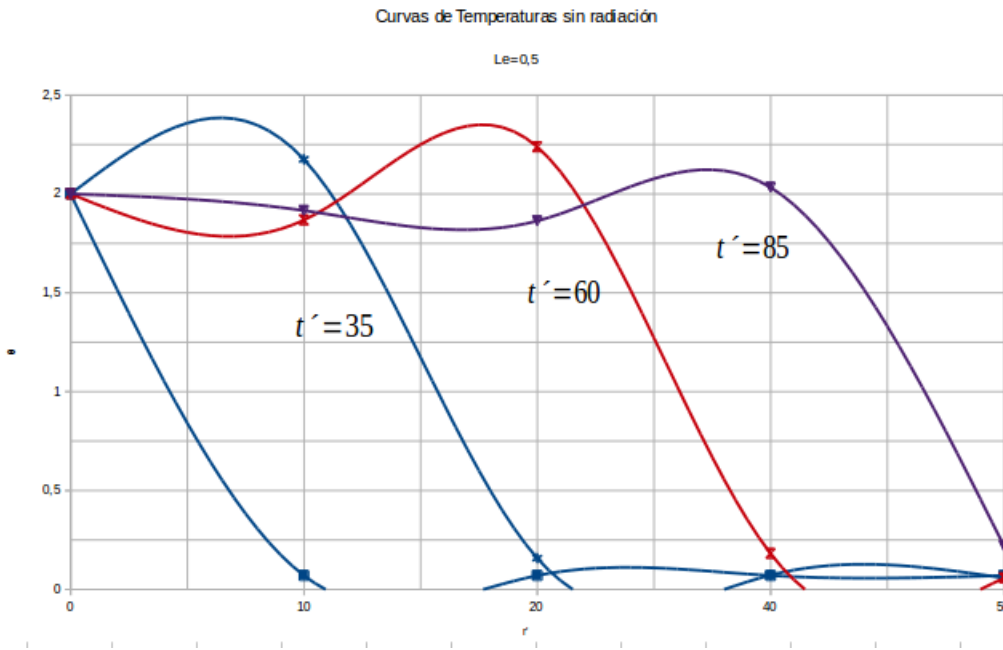


Figura 5.8: Diferencias Finitas de radiación.

En la figura 5.11 número se comparan los frentes de llama para $Le = 0$, $Le = 0,5$ y $Le = 1$ y su respectiva y la respectiva tabla de valores aparece en la tabla $\hat{A} \cdot \hat{A} \cdot \hat{A}$.

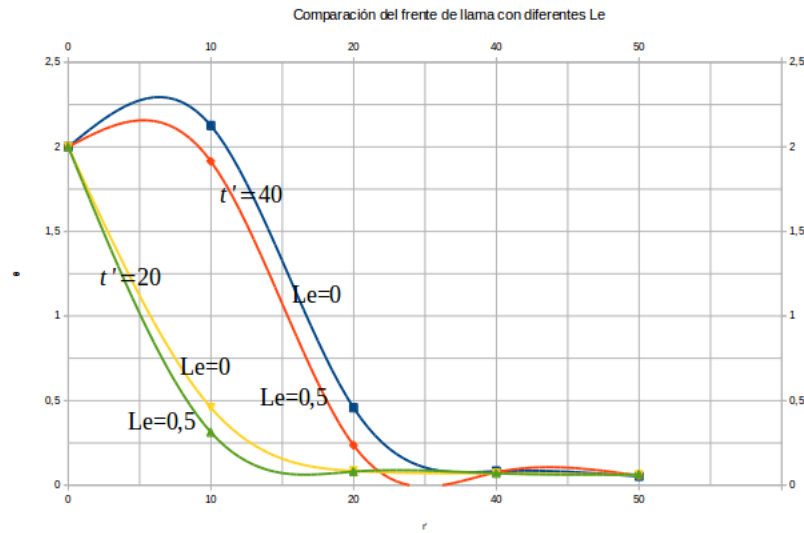


Figura 5.9: Comparación del frente de llama para con diferentes Le .

Como se aprecia al aumentar Le las curvas aumentan ligeramente su $\theta_{\text{máx}}$.

	L	0	10	20	40	50
Tiempo	Temperatura	2	0,07	0,07	0,07	0,07
	Densidad	0	1	1	1	1
10	Temperatura	2	0,1665	0,07	0,07	0,0665
	Densidad	0	1	1	1	1
15	Temperatura	2	0,26566642	0,074825	0,069825	0,06334835
	Densidad	0	0,99384179	1	1	1,00000083
20	Temperatura	2	0,45806411	0,0841218	0,06975106	0,06050234
	Densidad	0	0,93623025	0,99999764	1,00000005	1,00000204
25	Temperatura	2	1,04398723	0,10213163	0,070007	0,05793686
	Densidad	0	0,67246853	0,99998201	1,00000013	1,00000344
30	Temperatura	2	2,33486019	0,14789473	0,07100973	0,05564056
	Densidad	0	0,02738598	0,99984373	1,00000013	1,00000492
35	Temperatura	2	2,29799531	0,2591818	0,07408623	0,05362395
	Densidad	0	-0,01722722	0,99695221	0,99999978	1,00000644
40	Temperatura	2	2,12541109	0,45706268	0,08232164	0,05196278
	Densidad	0	0,01064467	0,94435472	0,99999791	1,00000798
45	Temperatura	2	2,06897125	1,05130516	0,09956413	0,05087948
	Densidad	0	-0,0059794	0,67957366	0,99998621	1,00000953
50	Temperatura	2	1,99620117	2,36712023	0,1449311	0,05076663
	Densidad	0	0,00323971	0,02331426	0,99987914	1,00001109
55	Temperatura	2	2,02475261	2,31386979	0,25636838	0,05293341
	Densidad	0	-0,00166807	-0,01488823	0,99736111	1,00001264
60	Temperatura	2	2,03288116	2,14821954	0,44994678	0,0604554
	Densidad	0	0,00087677	0,00927143	0,94692358	1,00001419
65	Temperatura	2	2,03968456	2,0866429	1,02832923	0,1769044
	Densidad	0	-0,0004635	-0,00528053	0,69045189	1,00001559
70	Temperatura	2	2,03862888	2,01502936	2,34416056	0,22816649
	Densidad	0	0,00024618	0,00289444	0,03770844	0,99124755
75	Temperatura	2	2,03627116	2,04147652	2,34497131	0,38446204
	Densidad	0	-0,00013066	-0,00151087	-0,02382506	0,96029547
80	Temperatura	2	2,03431807	2,05176227	2,15400306	0,81951468
	Densidad	0	6,9238E-005	0,00080349	0,01505896	0,78217033
85	Temperatura	2	2,03368613	2,05846974	2,12949725	1,99959171
	Densidad	0	-3,664E-005	-0,00043033	-0,00860637	0,20500615
90	Temperatura	2	2,03312897	2,05945823	2,09254472	2,52775589
	Densidad	0	1,9379E-005	0,00023152	0,00484657	-0,10581809
95	Temperatura	2	2,03284823	2,06050843	2,12767755	2,02338679
	Densidad	0	-1,025E-005	-0,00012465	-0,00266672	0,07229229
100	Temperatura	2	2,0325575	2,06210028	2,11077098	2,14793987
	Densidad	0	5,4166E-006	6,7153E-005	0,00150006	-0,03796166
110	Temperatura	2	2,03242333	2,06326342	2,114866	1,91952634
	Densidad	0	-2,863E-006	-3,622E-005	-0,00083499	0,02161739

Tabla 5.7: Comparación del frente de llama para $Le = 0,5$ y $Le = 0$ $\Delta t = 1$, $\Delta r = 10$, para un tiempo $t = 20$ y $t = 40$.

Valoración de la cota inferior.

Retomando la propuesta del autor donde

$$\begin{aligned}
g &= (1 - \theta')^n \\
h &= -\frac{dg}{d\theta'} = n(1 - \theta')^{n-1} \\
\int_0^1 (1 - \theta') d\theta &= \frac{1}{n+1} \\
v &\geq 2(n+1) \int_0^1 \sqrt{f[n(1 - \theta')^{2n-1} - B(1 - \theta')^n]} d\theta \\
f &= C(1 - \theta') \left[e^{-\frac{1}{\theta_0 + (\theta_{max} - \theta_0)\theta'}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right]
\end{aligned}$$

Con $Le = 0,5$, $C = 0,5$, $\frac{\Delta C_p}{C_p}$, $B = Le \frac{\Delta C_p}{C_p} = \frac{1}{4}$ y $n = 0,5$

$$v \geq 2(0,5 + 1) \int_0^1 \sqrt{f[0,5(1 - \theta')^{2(0,5)-1} - \frac{1}{4}(1 - \theta')^{0,5}]} d\theta$$

$$f = 0,5(1 - \theta') \left[e^{-\frac{1}{0,07 + (1,93)\theta'}} - e^{-\frac{1}{0,07}} \right]$$

Con el método de Simpson $\frac{1}{3}$ y $n = 10$ y tomando

$$F(\theta) = 3\sqrt{f(\theta)[0,5(1 - \theta')^0 - \frac{1}{4}(1 - \theta')^{0,5}]}$$

Entonces

$$\begin{aligned} I = \int_0^1 F(\theta) d\theta &= \frac{1-0}{3 \cdot (10)} [F(0) + 4F(0,1) + 2F(0,3) + 4F(0,3) \\ &+ 2F(0,4) + 4F(0,5) + 2F(0,6) + 4F(0,7) \\ &+ 2F(0,8) + 4F(0,9) + F(1)] \end{aligned}$$

$$f(0) = 0 \quad F(0) = 0$$

$$f(0,1) = 0,010044 \quad F(0,1) = 0,154136$$

$$f(0,2) = 0,044663 \quad F(0,2) = 0,333207$$

$$\int_0^1 F(\theta) d\theta = 0,3788$$

lo cual está de acuerdo con la figura 3 del artículo.

Para $Le = 0,5$ y $n = 1$ tenemos la siguiente tabla

TABLA 1			
	Le=0,5	n=0,5	
N=10	temperatura	f(t)	F(t)
	0	0	0
	0,1	0,01004363	0,15413573
	0,2	0,04463313	0,33320662
	0,3	0,07497076	0,44298655
	0,4	0,09148106	0,50222275
	0,5	0,09513298	0,52606346
	0,6	0,08858687	0,52209157
	0,7	0,0742104	0,49243446
	0,8	0,05381705	0,43361776
	0,9	0,02874945	0,33002563
	1	0	0
	Valor de la integral		0,37882869

Tabla 5.8: Valores de $f(t)$ y $F(t)$ para la evaluación de las cotas inferiores para la velocidad para $Le = 0,5$ y $n = 0,5$.

TABLA 2		
Le=0,5	n=1	
temperatura	f(t)	F(t)
0	0	0
0.1	0.01004363	0.3293496
0.2	0.04463313	0.65458237
0.3	0.07497076	0.79357066
0.4	0.09148106	0.81158095
0.5	0.09513298	0.75551167
0.6	0.08858687	0.65208665
0.7	0.0742104	0.51687274
0.8	0.05381705	0.35938965
0.9	0.02874945	0.18573997
1	0	0
Valor de la integral		0.50931526

Tabla 5.9: Valores de $f(t)$ y $F(t)$ para la evaluación de las cotas inferiores para la velocidad para $Le = 0,5$ y $n = 1$.

5.6 Determinación de la cotas inferiores: Una propuesta para $g(\theta)$.

Ahora se propondrá una función para construir unas cotas inferiores.

Sea $g(\theta) = e^{(-n\theta)}$, veamos si cumple con los requisitos:

$$g(\theta) = e^{(-n\theta)}$$

$$h = -\frac{dg}{d\theta} \implies h = -e^{(-n\theta)}(-n) = ne^{(-n\theta)}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^1 g(\theta) d\theta &= \int_0^1 e^{(-n\theta)} d\theta = -\frac{1}{n} e^{-n\theta} \Big|_0^1 \\
&= -\frac{1}{n} [e^{-n} - e^0] \\
&= -\frac{1}{n} [e^{-n} - 1] \\
&= \frac{1}{n} (1 - e^{-n})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v &\geq \frac{2 \int_0^1 \sqrt{f(\theta)g[h - Bg]} d\theta}{\frac{1}{n}(1 - e^{-n})} \\
&= \frac{2n}{(1 - e^{-n})} \int_0^1 \sqrt{f(\theta) \frac{1}{n}(1 - e^{-n\theta}) \left[ne^{-n\theta} - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{n}(1 - e^{-n\theta}) \right]} d\theta
\end{aligned}$$

Observación: $n \neq 0$.

Ensayemos para $n = 1$

$$v \geq \frac{2 \cdot 1}{(1 - e^{-1})} \int_0^1 \sqrt{f(\theta) \frac{1}{1}(1 - e^{-\theta}) \left[e^{-\theta} - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{1}(1 - e^{-\theta}) \right]} d\theta$$

Al igual que en la situación anterior

$$f(\theta) = 0,5(1 - \theta') \left[e^{-\frac{1}{0,07 + 1,93\theta'}} - e^{-\frac{1}{0,07}} \right]$$

Tomemos ahora

$$F(\theta) = \frac{2}{(1 - e^{-1})} \sqrt{f(\theta)(1 - e^{-\theta}) \left[e^{-\theta} - \frac{1}{4}(1 - e^{-\theta}) \right]} d\theta$$

Así

$$\begin{aligned}
\int_0^1 F(\theta) d\theta &= \frac{1 - 0}{3 \cdot (10)} [F(0) + 4F(0, 1) + 2F(0, 3) + 4F(0, 3) \\
&\quad + 2F(0, 4) + 4F(0, 5) + 2F(0, 6) + 4F(0, 7) \\
&\quad + 2F(0, 8) + 4F(0, 9) + F(1)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(0) &= 0 & F(0) &= 0 \\
f(0,1) &= 0,010044 & F(0,1) &= 0,091816 \\
f(0,2) &= 0,044663 & F(0,2) &= 0,250364
\end{aligned}$$

En la tabla 3 se muestran los cálculos para la integral $I = \int_0^1 F(\theta)d\theta = 0,2893$ la cual es un valor más bajo que los propuestos por los autores de los artículos.

Tabla 3		
Le=0,5	n=1	
temperatura	f(t)	F(t)
0	0	0
0,1	0,01004363	0,0918138
0,2	0,04463313	0,25028032
0,3	0,07497076	0,362626
0,4	0,09148106	0,42130217
0,5	0,09513298	0,43636784
0,6	0,08858687	0,4176805
0,7	0,0742104	0,37235331
0,8	0,05381705	0,30407276
0,9	0,02874945	0,20999936
1	0	0
Valor de la integral		0,28931042

tabla 6.0: Valores de $f(t)$ y $F(t)$ para la evaluación de las cotas inferiores de la velocidad con $Le = 0,5$ y $n = 1$.

Tabla 3,0		
Le=0	n=1	
temperatura	f(t)	F(t)
0	0	0
0,1	0,01004363	0,09304515
0,2	0,04463313	0,25750839
0,3	0,07497076	0,3796069
0,4	0,09148106	0,44986588
0,5	0,09513298	0,47673546
0,6	0,08858687	0,46860333
0,7	0,0742104	0,43094548
0,8	0,05381705	0,36510548
0,9	0,02874945	0,26351004
1	0	0
Valor de la integral		0,32191794

Tabla 6.1: Valores de $f(t)$ y $F(t)$ para la evaluación de las cotas inferiores de la velocidad con $Le = 0$ y $n = 1$.

Tabla 3,0		
Le=1	n=1	
temperatura	f(t)	F(t)
0	0	0
0,1	0,01004363	0,0905657
0,2	0,04463313	0,24283719
0,3	0,07497076	0,34480984
0,4	0,09148106	0,39065552
0,5	0,09513298	0,39186361
0,6	0,08858687	0,35961775
0,7	0,0742104	0,30262183
0,8	0,05381705	0,227197
0,9	0,02874945	0,13697414
1	0	0
Valor de la integral		0,25026518

Tabla 6.2: Valores de $f(t)$ y $F(t)$ para la evaluación de las cotas inferiores de la velocidad con $Le = 1$ y $n = 1$.

Para $n = 2$ y $Le = 0,5$

$$v \geq \frac{2 \cdot 2}{(1 - e^{-2})} \int_0^1 \sqrt{f(\theta) \frac{1}{2}(1 - e^{-2\theta}) \left[2e^{-2\theta} - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2}(1 - e^{-2\theta}) \right]} d\theta$$

$$F(\theta) = \frac{4}{(1 - e^{-2})} \sqrt{f(\theta) \frac{1}{2}(1 - e^{-2\theta}) \left[2e^{-2\theta} - \frac{1}{8}(1 - e^{-2\theta}) \right]} d\theta$$

$$\int F(\theta) d\theta = 0,5891$$

$$B = 0.5 * Le \quad Le = 0$$

$n = 1$

Le	v
0	0,3219
0,5	0,2893
1	0,2503

$n = 2$

Le	v
0	0,5943
0,5	0,5891
1	0,5834

En la tabla siguiente se muestran los resultados obtenidos para las dos propuestas junto con los valores experimentales.

Le	0	0,5	1
Prop n=1	0,322	0,289	0,250
Prop n=2	0,594	0,589	0,584
art n=1	0,560	0,520	0,460
art n=0,5	0,490	0,440	0,310
Valores Verdaderos	0,81	0,74	0,66

Tabla 5.3: Comparación entre las propuestas polinómica y exponencial.

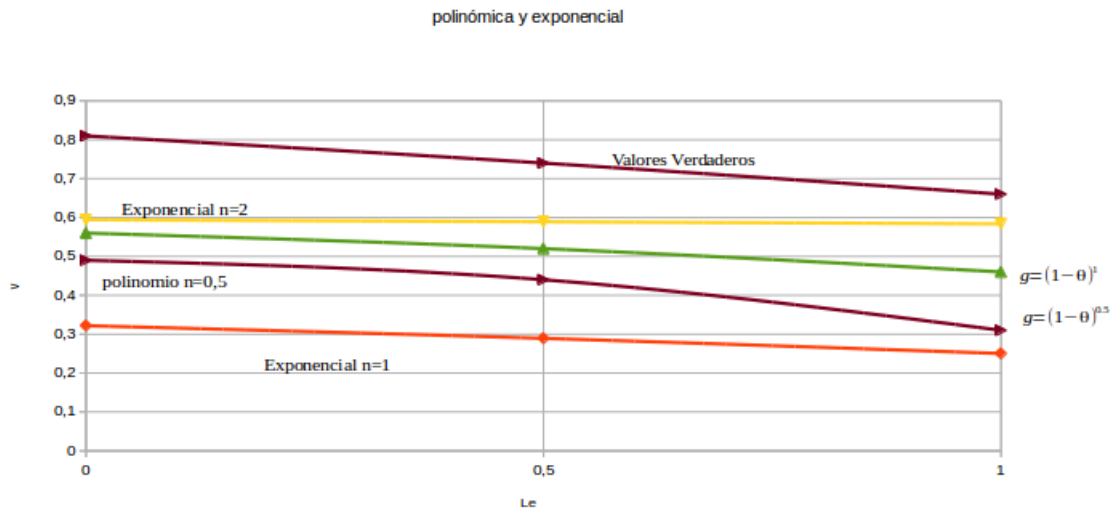


Figura 5.: Comparación entre las propuestas polinómica y exponencial.

A continuación se presenta la tabla de valores obtenidas por el método de diferencias finitas para el siguiente sistema:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial r'^2} + Le \frac{\Delta C_p}{C_p} \frac{\partial \rho'}{\partial r'} \frac{\partial \theta}{\partial r'} + \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) - \varepsilon(\theta^{0,4} - \theta^4) \quad (5.80)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = Le \frac{\partial^2 \rho'}{\partial r'^2} - C \rho' \left(e^{-\frac{1}{\theta}} - e^{-\frac{1}{\theta_0}} \right) \quad (5.81)$$

	t	0	10	20	40	50
Tiempo	*temperatura	0,07	0,07	0,07	2	0,07
	Densidad	0	0	0	0	1
10	*temperatura	0,07	0,07	0,07214444	1,35571207	0,07206667
	Densidad	0	0	0	0,00055556	0,98888889
15	*temperatura	0,07	0,07000238	0,07356832	1,21800307	0,07341327
	Densidad	0	0	3,0854E-007	0,00097703	0,99777916
20	*temperatura	0,07	0,07000634	0,07483606	1,12785588	0,07460419
	Densidad	0	1,7147E-010	8,5109E-007	0,00131533	0,99667077
25	*temperatura	0,07	0,0700117	0,0760008	1,06133309	0,07569259
	Densidad	0	6,4411E-010	1,5809E-006	0,00159659	0,99556365
30	*temperatura	0,07	0,07001834	0,07708903	1,00901269	0,07670496
	Densidad	0	1,5217E-009	2,4661E-006	0,00183676	0,99445775
35	*temperatura	0,07	0,07002618	0,07811667	0,9661623	0,07765726
	Densidad	0	2,8900E-009	3,4838E-006	0,00204631	0,99335305
40	*temperatura	0,07	0,07003514	0,07909438	0,93006146	0,07856018
	Densidad	0	4,8223E-009	4,6168E-006	0,00223246	0,9922495
45	*temperatura	0,07	0,07004516	0,08002976	0,89900243	0,07942133
	Densidad	0	7,3818E-009	5,8519E-006	0,00240034	0,99114708
50	*temperatura	0,07	0,0700562	0,08092851	0,87184397	0,08024646
	Densidad	0	1,0625E-008	7,1789E-006	0,00255372	0,99004576
55	*temperatura	0,07	0,07006822	0,08179503	0,84778663	0,08103998
	Densidad	0	1,4601E-008	8,5897E-006	0,00269539	0,98894552
60	*temperatura	0,07	0,07008117	0,08263286	0,82624934	0,08180546
	Densidad	0	1,9357E-008	1,0078E-005	0,00282751	0,98784634
65	*temperatura	0,07	0,07009502	0,08344484	0,80679707	0,08254577
	Densidad	0	2,4934E-008	1,1637E-005	0,00295172	0,98674818
70	*temperatura	0,07	0,07010974	0,08423336	0,78909601	0,08326333
	Densidad	0	3,1371E-008	1,3264E-005	0,00306932	0,98565104
75	*temperatura	0,07	0,07012531	0,08500041	0,77288474	0,08396017
	Densidad	0	3,8706E-008	1,4954E-005	0,00318135	0,98455489
80	*temperatura	0,07	0,07014169	0,08574769	0,75795487	0,08463801
	Densidad	0	4,6971E-008	1,6705E-005	0,00328862	0,98345971
85	*temperatura	0,07	0,07015886	0,08647667	0,74413778	0,08529835
	Densidad	0	5,6199E-008	1,8514E-005	0,0033918	0,98236547
90	*temperatura	0,07	0,07017681	0,08718863	0,7312952	0,08594251
	Densidad	0	6,6422E-008	2,0377E-005	0,00349143	0,98127217
95	*temperatura	0,07	0,0701955	0,0878847	0,71931243	0,08657163
	Densidad	0	7,7669E-008	2,2294E-005	0,00358798	0,98017977
100	*temperatura	0,07	0,07021493	0,08856585	0,70809334	0,08718673
	Densidad	0	0,00000009	2,4263E-005	0,00368181	0,97908827
110	*temperatura	0,07	0,07023507	0,08923298	0,69755661	0,08778874
	Densidad	0	1,0335E-007	2,6281E-005	0,00377323	0,97799763

Tabla 6.4: Valores obtenidos para las variables temperatura y densidad adimensionales considerando pérdidas por radiación.

Y finalmente se muestra una curva correspondiente a la tabla anterior.

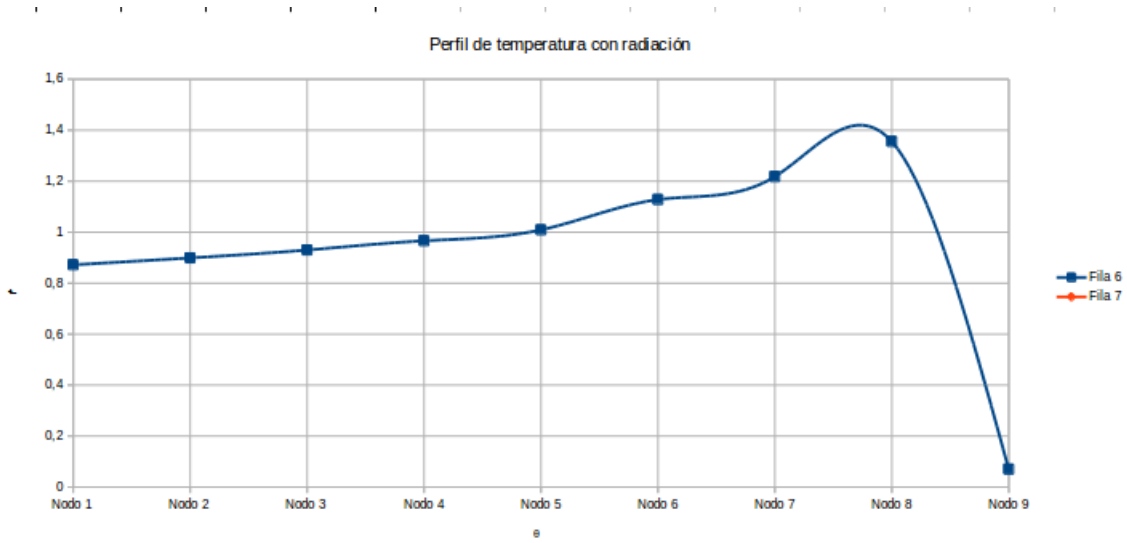


Figura 5.10: Onda típica para la llama con pérdidas radiativas.

Capítulo 6

Conclusiones

A través de experimentos que se han reportado en la literatura se evidencia que los procesos de combustión son afectados no solamente por los calores específicos de la especies, también depende de los coeficientes de difusión.

Las características anteriores modifican los patrones de los frente de onda de la llama. Estos efectos hasta ahora se no se había tendido en cuenta en los estudios los estudios analíticos sobre combustión.

En el trabajo que desarrollaron los autores dedujeron, inicialmente, dos ecuaciones diferenciales acopladas con las variables temperatura y densidad del combustible en una llama laminar premezclada.

Fundamentalmente el efecto difusivo añade un término adicional que involucra el número de Lewis Le en cual se constituye en un parámetro importante en los procesos de combustión.

El número de Le es una relación adimensional entre el coeficiente de difusión de masa y la conductividad de calor. El valor $Le = 0$ implica ausencia de procesos difusivos.

La primera aproximación realizada en el trabajo de los autores fue la de plantear un modelo sin pérdidas radiativas en dos ecuaciones acopladas que posteriormente redujeron el sistema a una sola ecuación diferencial en donde la única variable es la temperatura.

Una vez se obtiene una sola ecuación se generaliza el método de Benguria para obtener

las cotas superiores e inferiores para los frentes de llama como funciones del número de Lewis.

En el caso $Le = 0$ el límite superior se convertirá en la expresión clásica obtenida por los autores Aronson y Weinberger , mientras que el límite inferior, es, a de acuerdo con los resultados obtenidos por Benguria en sus trabajos.

Las predicciones hechas por las simulaciones numéricas están de acuerdo en orden de magnitud con las predichas en este trabajo. Sin embargo en algunos modelos de combustión simples sin difusión los resultados obtenidos pueden ser bastante diferentes a los obtenidos aquí, por ejemplo, con los métodos presentados otros autores como Kolmogorov-Petrovski-Piskunov.

Posteriormente se introdujeron las pérdidas debidas a la radiación en donde la llama reduce la velocidad y la propagación de los pulsos debido a la atenuación de la llama. Desafortunadamente la existencia de pulsos no permite la aplicación de los métodos aplicados debido a que el gradiente de temperatura cambia de signo.

No obstante las cotas superiores obtenidas en este trabajo se pueden comparar aún con las cotas superiores propuestas por Fort et al [7] para valores bajos del número de Lewis.

Capítulo 7

Bibliografía

- [1.] PUJOL Toni, FORT Joaquim, GONZÁLEZ Joseph, MONTORO Lino, PELEGRI Marc. "Bounds for the speed of combustion flames: The effect of mass diffusion." Elsevier. ScienceDirect Physic A.
- 2. BIRD Byron. "Fenómenos de Transporte". 2da edición, Editorial Limusa Wiley, 2007.
- 3. E. BRIZUELA and S ROMANO. "Combustión." Departamento de Ingeniería Mecánica y Naval, Facultad de Ingeniería UBA, España, 2003.
- 4. WARNATZ Jurgen , MAAS Ulrich, DIBLE Robert W. Combustion, cuarta Edición Springer, 2001.
- 5. GLASMAN Irwin, YETTER Richard."Combustion". Fourth Edition. Elsevier San Diego, 2008.
- 6. BENGURIA R.D. y M.C. DAPASSIER "Variational Characterization of the Speed of Propagation of Front for the Nonlinear Diffusion Equation". Facultad de Física. Universidad Católica de Chile. Santiago 1996.
- 7. FORT Joaquim,CAMPOS Daniel, GONZALEZ Joshep y VELAYOS Joaquim. "Bounds for the Propagation Speed of Combustion Flames". Institute of Physics Publishing. 2004.
- 8.CHAPRA, Steven C., and Raymond P. Canale. Numerical methods for engineers. Vol. 2. McGraw-Hill, 2012.

9. PUJOL Tony y FORT Joaquim "Determinación de los límites de velocidad de propagación en los frentes y pulsos de combustión". Departamento de Física. Escuela Politécnica Superior Girona, Italia.
10. PRESS William and TEULOSKY Saul, "Numerical Recipes in C". The art of scientific computing. Second edition Cambridge University Press 2002.
11. HOFFMAN Joe D "Numerical methods for engineers and scientists". Second edition. Marcel Dekker Inc. New York 2001.
12. HUNSDORFFER Willmen "Numerical solution of advection, diffusion, reaction-equation". lecture Notes. Thomas Stieltjes Institute. 2004.
13. LEVEQUE Randall "Finite difference methods for differential methods" Notas de clase. University of Washington. 2005
14. STRANG Gilbert "An analysis of the finite element method" Massachusetts Institute of Technology. Second Edition.